

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
НАУКИ
ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
им. А.Н. Несмейanova**

На правах рукописи

**ТАЛИС
Александр Леонидович**

**СТРУКТУРНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ
СИММЕТРИЙНЫХ КОНСТРУКЦИЙ В МЕТАЛЛАХ,
ТЕТРАКООРДИНИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЯХ
И СПИРАЛЬНЫХ БИОПОЛИМЕРАХ**

01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов

**ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук**

Москва
2020

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	10
Глава 1. Тетраэдрические и тетракоординированные упорядоченные структуры и математические конструкции, необходимые для отображения их симметрии. Обзор	
1.1. Системы Делоне. Теорема локальности.....	19
1.1.1. Кристаллографические разбиения 3-мерного евклидова пространства. Федоровские группы и конструкции алгебраической геометрии.....	22
1.1.2. Кристаллографические объединения линейных подструктур (стержней)	22
1.2. Полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала.....	23
1.3. N-мерные платоновы тела (политопы) и соты	24
1.3.1. Политоп {3,3,5} и алмазоподобный полурегулярный политоп {240}.....	26
1.4. Решетки (системы) корней, диаграммы Коксетера – Дынкина, группы Вейля.....	28
1.4.1. Кристаллографическая 8-мерная решетка E_8 . Расслоение Хопфа для политопов	35
1.4.2. Некристаллографическая 4-мерная система векторов H_4	41
1.5. Блоковый дизайн, система Штейнера, коды.....	43
1.5.1. Конечные проективные плоскости и конфигурации.....	47
1.6. Алгебраические группы.....	55
1.6.1. Группы $PSL(2,p)$, $p = 3, 5, 7, 11$	55
1.6.2. Группы Матье.....	60
Глава 2. Некристаллографическая симметрия цепей правильных тетраэдров: базовая структурная единица - тетраблок.....	
2.1. Введение.....	61
2.1.1. Преобразования евклидова пространства.....	61

2.1.2. Кристаллографическая и некристаллографическая симметрия.....	63
2.1.2.1. Кристаллографическая и некристаллографическая симметрия: определения.....	64
2.1.2.2. Некристаллографическая симметрия: примеры.....	65
2.1.3. Подходы для описания некристаллографической симметрии структур.....	66
2.1.3.1. Политопный подход.....	66
2.1.3.2. Подход более высоких размерностей.....	68
2.1.3.3. Конструирование 3-мерных евклидовых сеток из 2-мерных неевклидовых разбиений.....	69
2.1.3.4. Использование проективных специальных линейных групп.....	69
2.1.3.5. Описание некристаллографической симметрии: основная концепция.....	70
2.1.4. Определение проблемы.....	70
2.1.5. Основные результаты.....	72
2.1.6. Структура главы.....	72
2.2. Базовая симметрийная структурная единица цепи правильных тетраэдров и регулярные тетраэдрические разбиения пространств S^3 и H^3	75
2.2.1. Базовая симметрийная структурная единица: определение.....	76
2.2.2. Регулярные тетраэдрические разбиения пространства S^3 и тетраблок.....	76
2.2.3. Регулярные тетраэдрические разбиения пространства H^3 и тетраблок.....	79
2.3. Комбинаторные конструкции и некристаллографическая симметрия.....	79
2.3.1. Комбинаторная структура правильного тетраэдра:	

2-(4,3,2)-схема.....	80
2.3.2. Свойства 2-(7,4,2)-схемы.....	81
2.3.3. Регулярная 7-вершинная триангуляция тора и 2-(7,3,1)-схема.....	82
2.4. Нерегулярная 7-вершинная триангуляция сферы и тетраблок.....	84
2.5. Реализация 7-вершинной регулярной триангуляции тора в виде многогранника и тетраблок.....	85
2.6. Симметрия тетраблока: теоретико-групповое описание.....	87
2.6.1. Энантиоморфные варианты тетраблока.....	87
2.6.1.1. Квартика Клейна.....	87
2.6.1.2. Разбиение вершин квартики Клейна на 7 наборов...	88
2.6.1.3. Пересортировка вершин квартики Клейна: от 7 наборов к 4 наборам.....	90
2.6.1.4. Группа симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока.....	91
2.6.2. Неэнантиоморфный вариант тетраблока.....	92
2.6.2.1. Взаимные трансформации тетраблоков.....	92
2.6.2.2. Разбиение удвоенных вершин квартики Клейна на 7 наборов.....	93
2.6.2.3. Пересортировка удвоенных вершин квартики Клейна: от 7 наборов к 4 наборам.....	93
2.6.2.4. Группа симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока.....	94
2.7. Симметрия цепей, полученных сборкой тетраблоков: теоретико-групповое описание.....	95
2.7.1. Замкнутые спирали из тетраблоков: описание симметрии....	95
2.7.2. От замкнутых спиралей из тетраблоков к бесконечным цепям из тетраблоков	96
2.7.3. Примеры тетраблочных спиралей.....	97
2.7.3.1. Спирали типа Бердийка–Коксетера.....	97

2.7.3.2. Тетраблочная спираль с осью 40/11 и а-спираль.....	98
2.7.3.3. Тетраблочная спираль с осью 10/3 и башня из пентагональных антипризм.....	100
2.8. Расширение группы $PSL(2,7)$ до группы $PGL(2,7)$	102
2.9. Заключение.....	102
Глава 3. Система порождающих кластеров плотноупакованных тетраэдрических структур (металлов). Линейные структуры из порождающих кластеров и их симметрийно-возможные трансформации.....	104
3.1. Система корней H_4 и n-вершинные, $4 \leq n \leq 10$, объединения тетраэдров.....	104
3.2. Система порождающих кластеров тетраэдрических структур.....	109
3.3. Битетраблок - 11 вершинное объединение по грани двух тетраблоков.....	112
3.4. Винтовые оси, определяемые решеткой E_8	114
3.4.1. Накрытие над букетом окружности и сферы.....	116
3.4.2. Примеры спиралей Госсета с осями L/d	121
3.5. Тетраспирали с нецелочисленными винтовыми осями	123
3.5.1. Тетраспираль 30/11 и спираль с винтовой осью 8/3.....	123
3.5.2. Обвивание тетраспирали 30/11 спиралью 15/4 из тетраэдров	128
3.5.3. Спираль из одношапочных октаэдров	130
3.6. ГЦК - решетка как квадратная решетка непересекающихся трансформированных тетраэдрических спиралей	131
3.7. Кристалл β -Mn как пример сборки геликоидов Госсета.....	133
3.8. «Магический» кластер палладия Pd_{56} как подструктура декорированного политопа $\{3,3,5\}$	135
3.9. Заключение.....	137

Глава 4. Система порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур.....	140
4.1. Параллелоэдр алмаза как евклидова реализация конфигурации Фано 7_3	140
4.2. Конфигурация Мебиуса – Кантора 8_3 и объединение двух полиэдров Бернала $Z8$	144
4.3. Конфигурации $(9_3)_1, (9_3)_2, (9_3)_3$, их особые подконфигурации и определяемые ими кластеры.....	146
4.4. Конфигурация Дезарга 10_3 и алломорфное отображение 20–вершинного кластера алмаза в додекаэдр.....	148
4.5. Алмазоподобный полурегулярный политоп $\{240\}$ и его линейные подструктуры.....	151
4.5.1. Построение политопа $\{240\}$ по “замкнутому” алгоритму Госсета.....	151
4.5.2. Расслоение Хопфа и 2 варианта разбиения политопа $\{240\}$ на линейные подструктуры.....	154
4.6. Порождающие кластеры углеводородно-подобных цепей.....	157
4.6.1. Молекулярная основа биомембран.....	157
4.6.2. Описание некристаллографической симметрии углеводородных компонентов фосфолипидов.....	160
4.6.2.1. Составной тетраблок.....	162
4.6.2.2. Декорированный тетраблок.....	164
4.6.2.3. Конструирование “углеводородно-подобных” цепей.....	172
4.7. Вторая координационная сфера алмазоподобной структуры и таблица инцидентности $PG(2,3)$	180
4.7.1. Порождающие кластеры алмазоподобных структур, определяемые подтаблицами $PG(2,3)$	182
4.7.2. Взаимные трансформации 14–вершинных порождающих кластеров алмазоподобных структур.....	185

4.8. Конечные проективные плоскости PG(2,3) и PG(2,4).	
Кластеры алмазоподобных структур, содержащие икосаэдры в координационных сферах.....	186
4.9. Несамодуальные и недезарговы конфигурации и определяемые ими порождающие кластеры алмазоподобных структур с сильноискаженными тетраэдрическими углами.....	189
4.10. Система порождающих кластеров алмазоподобных структур.....	192
4.11. Заключение.....	195

Глава 5. Алмазоподобные структуры как результат закономерной сборки спиралей, генерируемых порождающими кластерами с пента-, гекса- и гептациклами.....	197
5.1. Введение.....	197
5.2. Кристаллографические решетки и параллелоэдр структуры алмаза.....	198
5.2.1. Структура алмаза и ее однозначное отображение в решетку декорированных ромбов.....	203
5.3. Представление кластера, генерирующего стержень алмазоподобной структуры декорированным полигоном.....	205
5.3.1. Представление алмазоподобной структуры, допускающей аппроксимацию объединением стержней, разбиением плоскости на декорированные полигоны.....	208
5.3.2. Группы цветной симметрии разбиений плоскости на декорированные полигоны.....	211
5.4. Полиэдр, разбитый на декорированные полигоны, как база расслоения Хопфа, определяющего объединение стержней в детерминированную некристаллическую алмазоподобную структуру (ДНАС).....	212
5.5. Трехкоординированное разбиение плоскости, определяемое особой подсистемой системы E_8	214

5.5.1. Икосидодекаэдр, разбитый на декорированные полигоны, как база расслоения Хопфа, определяющего объединение стержней в ДНАС.....	221
5.6. ДНАС и Модели Коннела–Темкина, Полка для аморфного кремния.....	226
5.7. Заключение.....	227
Глава 6. Трехуровневая (полиэдры-полости, стержни, объединения стержней) модель строения тетракоординированной структуры газогидрата и симметрийно возможные фазовые переходы.....	230
6.1. Введение. Газогидраты, особенности их строения.....	230
6.2. Полиэдры – полости газогидратов и конструкции алгебраической геометрии.....	234
6.2.1. Трансформация додекаэдра в кластер алмазоподобной структуре.....	236
6.2.2. Специальные конфигурации Дезарга и равнореберные 20-вершинники тетракоординированных структур.....	239
6.3. Полиэдр Кельвина, группы $PSL(2,11)$, Матье и другие алгебраические группы.....	243
6.3.1. Алгебраическое определение таблицы инцидентности бихроматического графа полиэдра Кельвина $[4^6, 6^8]$	249
6.3.2. Замкнутый набор простых 24-вершинных, 14-гранных полиэдров, эквивалентных полиэдру Кельвина по группе Матье M_{12}	253
6.3.3. Простые 24-вершинные 14-гранные полиэдры, не являющиеся стереоэдрами в газогидратах.....	262
6.4. Закономерности полиэдральной сборки упорядоченной тетракоординированной структуры газогидрата и локальные фазовые превращения.....	265
6.5. Решетка E_8 , политопы и линейные подструктуры газогидратов	

с некристаллографической симметрией.....	267
6.6. Модели фазового перехода газогидрат – лед.....	270
6.7. Заключение.....	273
Глава 7. Закономерности строения спиральных биополимеров	
как структурные представления конструкций	
алгебраической геометрии. Пример α-спиралей	275
7.1. Введение.....	275
7.2. Тетраэдрические спирали в политопе $\{3,3,5\}$	276
7.2.1. Обвивающая тетраспираль спираль тетраблоков с винтовой осью $15/4$	279
7.3. Минимальная поверхность с нулевым индексом неустойчивости, определяющая особый шаговый угол спирали.....	281
7.4. Подструктуры политопа $\{3,4,3\}$, конструкция Госсета и винтовая ось $40/11$	284
7.4.1. Орбита тетраблоков винтовой оси $40/11$	289
7.5. Структура α -спиралей.....	293
7.5.1. Структурные параметры α -спиралей, входящей в спираль из α -спиралей (суперспираль).....	296
7.5.2. Эталонное для α -спиралей отношение числа остатков на виток.....	297
7.5.3. Спираль тетраблоков с винтовой осью $40/11$ как идеальная модель α -спиралей.....	299
7.6. Модели объединения α -спиралей в глобулярных белках как реализации конструкций алгебраической геометрии.....	302
7.6.1. Полиэдры Бернала и оптимальная упаковка на сфере пар кругов максимального углового радиуса.....	306
7.7. Заключение.....	310
Выводы.....	313
Литература.....	316

Введение

Актуальность работы. Кристаллической структуре соответствует разбиение на многогранники (полиэдры) 3-мерного евклидова пространства E^3 , симметрию которого соответствующая федоровская (пространственная) группа отображает лишь частично [1]. Для описания структуры необходимо знать координаты вершин полиэдров, к которым “привязаны” атомы, федоровские же группы - набор матриц поворотов и сопряженных с поворотами переносов - координаты дать не могут. Поэтому разные разбиения (разные структуры) могут иметь одну и ту же федоровскую группу. Неслучайно важнейшее в кристаллографии понятие структурного типа до сих пор не имеет строгого определения, а характеризуется набором атрибутов (пространственная группа, позиции Вайкова, параметры элементарной ячейки, химическая формула). По умолчанию, первичной в структуре считается бесконечная решетка примитивных ячеек, которые выбираются бесконечным числом способов, что ограничивает возможности этого понятия для построения физических теорий явлений в кристаллах. Поскольку нет адекватного описания структуры, то нет, в частности, и адекватного описания ее превращения в другую структуру. Известны попытки создать симметрийную теорию полиморфных превращений на основе соотношений группа - подгруппа [2]: группы симметрий фаз - партнеров по фазовому превращению являются подгруппами симметрии некоторой общей для них прафазы.

Из-за указанного фундаментального ограничения опирающейся на федоровские группы традиционной кристаллографии (неполного описания симметрии структуры) стала очевидной необходимость расширения ее симметрийного базиса. Федоровские группы - лишь одно из структурных приложений алгебраической геометрии, естественно обратиться и к другим. Упрощая (и не искажая), можно сказать, что, поскольку геометрический объект представим аналитической функцией, симметрийные преобразования пространства можно описывать на языке решения алгебраических уравнений разных степеней. Решения этих уравнений (корни) дадут компоненты векторов, а концы векторов (координаты) будут соответствовать позициям атомов в структуре. Например, плоскости зеркального отражения, как и всякой плоскости, соответствует уравнение первой степени. Последовательное действие двух зеркальных плоскостей, образующих между собой некоторый угол ϕ , называют произведением этих плоскостей, и для такой операции мы получаем уже квадратное уравнение, а сама она тождественна повороту на угол 2ϕ . Понятно, что при описании результата действия нескольких плоскостей мы столкнемся с уравнениями более высоких степеней. Это приводит нас к n -мерным, $n > 3$, геометрическим конструкциям и группам перестановок, которые могут быть и некристаллографическими, свойственными комбинаторной (конечной проективной), алгебраической геометрии.

Минимальная часть E^3 – это тетраэдр (симплекс E^3); широкий класс упорядоченных структур можно свести к комбинации структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров. Отображение риманова пространства на *соприкасающееся* евклидово сохраняет, с точностью до бесконечно малых второго порядка, все расстояния, измеренные в соседстве с заданной кривой. Если подструктура упорядоченной, кристаллической или некристаллической, структуры в E^3 является линейной, то расположение атомов в ней может определяться симметриями неевклидовых математических конструкций. Таким образом, по крайней мере для структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, возможно снятие основных ограничений классической кристаллографии посредством перехода к n -мерному евклидову пространству E^n , $n > 3$, неевклидовым геометриям, конструкциям комбинаторной (в частности, конечной проективной) и алгебраической геометрии. Данные математические конструкции позволяют отобразить симметрию упорядоченных систем точек и, следовательно, стать основой для отображения (некристаллографической) симметрии упорядоченных (не только кристаллических) тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров. Большой интерес представляет также и отображение некристаллографической симметрии таких объединений правильных тетраэдров по граням, которые могут быть трансформированы в m -вершинные ($4 \leq m \leq 10$) полиэдры Бернала, возникающие в плотнейших нерешетчатых упаковках шаров одинакового радиуса.

Помимо работ по квазикристаллам (например, [3, 4]), наиболее “структурными” примерами таких работ можно считать работы, использующие аппарат регулярных разбиений трехмерных пространств S^3 и H^3 Римана и Лобачевского [5-13], эллиптической геометрии [14], теории расслоенных пространств [15], решеток корней [16] и т.п. Наряду с группами (соответствующих геометрий) использовались поля [17], алгебры [15] и другие конструкции. Тем не менее, в рамках всех этих расширений классической кристаллографии аппарат для адекватного отображения симметрии упорядоченных (не только кристаллических) структур создан не был. Либо математическая основа была недостаточно широка, либо наоборот - сложнейший математический аппарат был подкреплен лишь несколькими (довольно абстрактными) двумерными примерами.

По нашему мнению, необходимый аппарат должен быть подобен федоровским группам: строгий (например, [18, §§48-52]) математический аппарат, являющийся основой для предельно наглядного алгоритма отображения симметрии структур (например, [19]). Всем этим требованиям отвечает комбинаторная – в частности, проективная (а в более широком смысле - алгебраическая) геометрия, включающая в единую схему геометрии Евклида, Лобачевского и Римана [20; с.242].

Таким образом, **актуальной** является разработка аппарата, способного отображать симметрию упорядоченных (не только кристаллических) тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров (или m -вершинных, $4 \leq m \leq 10$, объединений тетраэдров).

Цель работы состояла в разработке подхода для отображения некристаллографической симметрии упорядоченных (не только кристаллических) структур: металлов, тетракоординированных соединений и спиральных биополимеров, допускающих аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров или m -вершинных ($4 \leq m \leq 10$) объединений тетраэдров по граням.

Достижение цели осуществлялось решением ряда **задач**:

- отбором совокупности некристаллографических конструкций (конечных проективных геометрий, n -мерных, $3 < n \leq 8$ многогранников и решеток, расслоенных пространств, конструкций комбинаторного дизайна), потенциально способных отобразить симметрии тетраэдрических и тетракоординированных структур;
- определением структурной единицы (тетраблока), универсальной для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, и теоретико-групповым описанием симметрии тетраблока;
- построением системы m -вершинных, $4 < m \leq 10$, порождающих кластеров тетраэдрических структур;
- построением системы порождающих кластеров тетракоординированных (алмазоподобных) структур;
- построением линейных объединений порождающих кластеров, реализующихся в (а) металлах и сплавах, (б) алмазоподобных структурах, (в) газогидратах, (г) спиральных биополимерах;
- разработкой аппарата для описания симметрии объединений из линейных объединений порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур.

Методология и методы исследования. Математические основы использованного аппарата изложены в работах [1-12, 15, 16, 21-38], которые образуют базу развивающейся автором “обобщенной кристаллографии тетраэдрических и тетракоординированных структур”. В частности, использован аппарат алгебраических групп, конструкции n -мерных ($3 < n \leq 8$) решеток и многогранников, конструкции комбинаторной (конечной проективной) геометрии.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 7 глав и выводов, объем составляет 338 страниц, в том числе 133 рисунка и 14 таблиц. Список литературы включает 304 наименования.

Во **Введении** изложены проблемы, связанные с описанием изучаемых структур при отсутствии разработанного симметрийного аппарата. Обозначен общий круг вопросов, рассматриваемых в работе, сформулированы цели, задачи, данные о новизне полученных результатов, их практической и теоретической ценности; описана общая структура работы.

Первая глава посвящена обзору литературы по тетраэдрическим и тетракоординированным упорядоченным структурам и математическим конструкциям, необходимым для отображения их симметрии.

В главах 2-7 приведены результаты собственных исследований.

Вторая глава посвящена некристаллографической симметрии структур и описанию структурной единицы (тетраблока), универсальной для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров.

В **третьей** главе описана система порождающих кластеров плотноупакованных тетраэдрических структур (металлов). Описаны нецелочисленные винтовые оси, определяемые решеткой E_8 , геликоиды Коксетера с нецелочисленными винтовыми осями $30/11$, $8/3$, гранецентрированная кубическая решетка как квадратная решетка непересекающихся трансформированных геликоидов Коксетера, кристалл β -Mn как пример сборки геликоидов Госсета, “магический” кластер палладия Pd_{561} .

В **четвертой** главе описана система порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур: параллелоэдр алмаза как евклидова реализация конфигурации Фано 7_3 , взаимные трансформации 14-вершинных порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур. Описаны конечные проективные плоскости $PG(2,3)$ и $PG(2,4)$, кластеры алмазоподобных структур, содержащие икосаэдры в координационных сферах, порождающие кластеры алмазоподобных структур и углеводородно-подобных цепей.

Пятая глава посвящена вопросам сборки стержней, генерируемых порождающими кластерами системы, в упорядоченные алмазоподобные структуры. Рассмотрена структура алмаза и ее однозначное отображение в решетку декорированных полигонов, упорядоченная некристаллическая алмазоподобная структура, определяемая политопом {960}.

В **шестой** главе описана трехуровневая модель строения тетракоординированной структуры газогидрата и симметрийно возможные фазовые переходы. Описаны закономерности полиэдральной сборки упорядоченной тетракоординированной структуры газогидрата и локальные фазовые превращения, линейные подструктуры газогидратов с некристаллографической симметрией, упорядоченные структуры клатратов (газогидратов) как объединения геликоидов с нецелочисленными винтовыми осями, модели фазового перехода газогидрат I – лед.

В **седьмой** главе обсуждены закономерности строения спиральных биополимеров как структурных представлений системы конструкций алгебраической геометрии и рассмотрен пример α -спиралей. Обсуждены ее структурные параметры, спиральная упаковка тетраблоков как модель α -спиралей, и модель объединения α -спиралей в глобуллярных белках.

Завершается работа разделами **Выводы и Литература**.

Научная новизна работы определяется тем, что в ней **впервые**:

- создан подход, который позволил преодолеть ограничения классической кристаллографии и более полно отобразить симметрию строения широкого класса упорядоченных (не только кристаллических) структур;
- отобраны математические конструкции, реализациями которых в 3-мерном евклидовом пространстве являются упорядоченные тетраэдрические и тетракоординированные структуры, допускающие аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров (или m -вершинных, $4 \leq m \leq 10$, объединений тетраэдров);
- дано теоретико-групповое описание симметрии структурной единицы (тетраблоука), универсальной для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров;
- построена система m -вершинных, $4 < m \leq 10$, порождающих кластеров тетраэдрических структур и система порождающих кластеров тетракоординированных (алмазоподобных) структур;
- рассмотрены три типа высокосимметричных спиралей, образованных из тетраблоков одинаковой хиральности и однотипно объединенных по торцевым граням и показано их соответствие спиральным структурам, наблюдающимся экспериментально; параметры одной из “тетраблоочных” спиралей (отношение шага к радиусу и шаговый угол) с точностью до нескольких процентов отвечают параметрам полипептидной цепи белков (α -спирали);
- разработан аппарат для описания симметрии объединений из линейных объединений порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, алмазоподобных пленок).

Теоретическая значимость работы состоит в создании подхода, который можно назвать “обобщенной кристаллографией тетраэдрических и тетракоординированных структур”. Данный подход позволяет преодолевать ограничения классической кристаллографии и более полно отображать симметрию строения широкого класса упорядоченных (не только кристаллических) тетраэдрических и тетракоординированных структур. Развиваемый подход может быть положен в основу теории симметрии линейных

(био)полимеров, структура которых допускает аппроксимацию цепями правильных тетраэдров; разработка такой теории необходима для построения их симметрийной (некристаллографической) классификации.

Практическая значимость работы состоит в том, что применение развитого подхода для исследуемой тетраэдрической или тетракоординированной структуры, допускающей аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров (или m -вершинных, $4 \leq m \leq 10$, объединений тетраэдров) позволяет определить идеальную (математическую) структуру – прототип. Выявленный прототип способствует адекватной интерпретации структурно-обусловленных экспериментальных данных и позволяет *a priori* определять фазовые переходы, симметрийно – возможные для данной структуры.

На защиту выносятся:

- подход, позволяющий отобразить (или отобразить более полно, чем в классической кристаллографии) симметрию упорядоченных, не только кристаллических, тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями объединенных по граням правильных тетраэдров (или m -вершинных, $4 \leq m \leq 10$, объединений тетраэдров);
- тетраблок как симметрийная структурная единица, универсальная для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров;
- трактовка порождающих кластеров металлов, тетракоординированных соединений (алмазоподобных структур, газогидратов) и спиральных биополимеров, как структурных реализаций конструкций комбинаторной (конечной проективной) геометрии;
- система m -вершинных, $4 < m \leq 10$, порождающих кластеров тетраэдрических структур;
- система порождающих кластеров тетракоординированных (алмазоподобных) структур;
- линейные объединения порождающих кластеров, как идеальные прототипы, реализующиеся в (а) металлах и сплавах, (б) алмазоподобных структурах, (в) газогидратах, (г) спиральных биополимерах;
- спиральная структура из тетраблоков одной хиральности с искажениями ребер $\sim 2\%$, однотипно объединенных по торцевым граням, как приближение идеального высокосимметричного образца полипептидной цепи белков (α -спирали) с осью 40/11;
- аппарат для описания симметрии объединений из линейных объединений порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, алмазоподобных пленок).

Публикации. Основные материалы диссертации представлены в 7 главах в книгах [33-38, 115] и в 56 опубликованных работах в рецензируемых научных журналах; из них 35 –

в центральных российских журналах [39, 41-44, 47-55, 57, 59, 60, 62-65, 69, 70, 73, 76, 77, 80, 83, 85, 87, 88, 125-127, 130] и 21 – в международной печати [40, 45, 46, 56, 58, 61, 66-68, 71, 72, 74, 75, 78, 79, 81, 82, 84, 86, 128, 129]. По теме диссертации опубликовано 30 статей в сборниках статей [89-114, 116-118, 239], 12 кратких сообщений в журналах [119-124, 131-136], а также несколько десятков тезисов Всероссийских и Международных конференций.

Личный вклад автора. Материал диссертационной работы получен при непосредственном участии автора на всех этапах работы: постановки и решении задач, при интерпретации и обсуждении полученных результатов, подведении итогов отдельных этапов работы, обобщении полученных результатов и формулировке выводов, написании научных статей, определении направлений дальнейших исследований. Большинство результатов, описанных в работе, получено непосредственно автором.

Работа выполнена в Институте элементоорганических соединений имени А.Н. Несмиянова РАН. В процессе выполнения отдельных ее этапов она была поддержана:

- грантами отделения химии и наук о материалах РАН ОХМ-7 (Динамика образования и изучение строения клатратных гидратов, 2003-2005), ОХМ-7 (Теоретическое и экспериментальное исследование фазового перехода “газогидрат-лед”, 2006-2008), ОХМ-6 (Построение теории и моделирование фазового перехода “газогидрат-лед”, реализуемого переброской минимального числа водородных связей, 2009-2011);
- грантами Президиума РАН ПРАН “Поддержка инноваций” (Моделирование процессов входа и выхода молекул гостей в газогидратах, осуществляющее теоретическими и экспериментальными методами, 2006-2008), ПРАН “Создание и совершенствование методов химического анализа и исследования структуры веществ и материалов” (Совершенствование приборной базы микроскопии для исследования объектов нанометрового уровня, 2009);
- грантами Российского фонда фундаментальных исследований 03-02-16446_а (Построение обобщенной кристаллографии плотноупакованных тетраэдрических металлических структур как структурного приложения алгебраической геометрии, 2003-2005), 05-03-32539_а (Теоретическое моделирование и расчет энергии фазового перехода газогидрат-лед, 2005-2007), 08-02-13500фи_ц (Разработка и исследование свойств магнитных метаматериалов на основе опаловых матриц (правильных упаковок наносфер SiO_2), пригодных для применения в СВЧ-устройствах, 2008-2009), 09-02-13531фи_ц (Фундаментальные основы получения и применения некристаллических пространственно неоднородных материалов с модуляцией (дисперсией) электрических и диэлектрических параметров в диапазоне 150-300 нм и размером активных областей 5-50 нм для разработки элементной базы нового поколения твердотельной СВЧ-электроники, 2009-2010), 09-03-00740_а (Построение теории и моделирование структурного механизма фазового превращения газогидрата в лёд, 2009-

2011), 11-02-00296_а (Теоретическое исследование атомных неоднородностей (кластеров) в твердых и жидких металлических растворах в рамках теории функционала плотности, 2011-2013), 11-02-12095офи_м (Фундаментальные исследования магнито- и электрооптических эффектов, а также распространения электромагнитных волн в метаматериалах на основе решетчатых упаковок наносфер SiO₂ с заполнением межсферических нанополостей мультиферроиками тороидального типа (ферротороидные системы), 2011-2012), 14-02-00079_а (Кристаллохимическая модель эвтектоидного превращения в системе железоуглерод, сформулированная на языке алгебраической геометрии, 2014-2016);

– грантом Российского научного фонда 14-19-01726 (Разработка нового поколения экономнолегированных конструкционных сталей с однородной структурой, высоким и стабильным комплексом свойств на базе оригинальных научных принципов обеспечения благоприятной формы существования примесей, неметаллических включений, 2014-2016).

За подготовку и издание книги “Комплексные неметаллические включения и свойства стали” была получена Золотая медаль лауреата Международной промышленной выставки “Металл-Экспо – 2016”.

Достоверность полученных в работе результатов и выводов обеспечивается фундаментальностью тех математических конструкций комбинаторной и алгебраической геометрии, которые использованы в работе; надежностью использованных исходных экспериментальных и расчетных данных для структур, рассматриваемых как представления этих математических конструкций; достигнутым совпадением результатов автора с теми экспериментальными и/или теоретическими (структурными) данными из других работ для рассматриваемых упорядоченных структур, сравнение с которыми является обоснованным.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались:

на International school “Topology in Condensed Matter” (Dresden, Germany, 2002); III International symposium “Molecular design and synthesis os supramolecular architectures (Казань, 2004); X International Seminar on Inclusion Compounds (ISIC-10) (Москва, 2005); XX Congress of the international union of crystallography (Florencia, Italy, 2005); IX Conference of the European Ceramic Society (Portoroz, Slovenia, 2005); International congress of mathematicians (Madrid, Spain, 2006); International Workshop “Statistical Mechanics of Polymers, New Developments” (Москва, 2006); IV Национальной Кристаллохимической конференции (Черноголовка, 2006); 23-rd European Crystallographic Meeting (Leuven, Belgium, 2006); XIII, XVI, XVII Симпозиумах по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул (С-Петербург, 2006, Владимир, 2014, Ярославль, 2016); XV Семинаре по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул (Москва, 2013); XIII, XIV, XVII, XXV Всероссийских конференциях “Структура и динамика молекулярных систем” (Яльчик, 2006,

2007, 2010, 2018); XIX Симпозиуме “Современная химическая физика” (Туапсе, 2007); Всероссийской конференции “Новые подходы в химической технологии и практика применения процессов экстракции и сорбции” (Санкт-Петербург, 2009); V Национальной кристаллохимической конференции (Казань, 2009); 26th European Crystallographic Meeting (Darmstadt, Germany, 2010); XVIII, XIX, XX Международной конференции “Высокие технологии в промышленности России” (Москва, 2012, 2014, 2015); VIII, XI, XII Всероссийской научной школе “Математические исследования в естественных науках” (Апатиты, 2012, 2014, 2015); Всероссийской конференции “Актуальные проблемы физики полимеров и биополимеров”, посвященной 100-летию со дня рождения М.В. Волькенштейна и А.А. Тагер (Москва, 2012); Шестой и Седьмой Всероссийской Каргинской конференции “Полимеры – 2014”, “Полимеры – 2017” (Москва, 2014, 2017); International conference on martensitic transformations, ICOMAT-2014, ICOMAT-2017 (Bilbao, Spain, 2014; Chicago, USA, 2017); VIII, IX Международной конференции “Фазовые превращения и прочность кристаллов” (Черноголовка, 2014, 2016); Шестой Международной конференции “Кристаллофизика и деформационное поведение перспективных материалов” (Москва, 2015); XX Международной конференции по постоянным магнитам (Сузdal, 2015); XIV Российской конференции “Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов” (Екатеринбург, 2015); VIII и IX Национальной кристаллохимической конференции (Сузdal, 2016, 2018); Международной конференции по химии и физикохимии олигомеров “Олигомеры-2017”, “Олигомеры-2019” (Черноголовка, 2017; Нижний Новгород, 2019); на семинарах и конференциях Института элементоорганических соединений имени А.Н. Несмиянова РАН (Москва, 2010 - 2017).

Благодарности. Автор выражает искреннюю признательность коллегам, плодотворные дискуссии с которыми, консультации и помощь способствовали проведению работы на разных ее этапах: к.ф.-м.н. Т.Н. Тарховой, д.ф.-м.н. Е.В. Чупрунову, к.г.-м.н. Л.И. Циноберу, д.ф.-м.н. В.А. Копцику, проф. Л. Данцеру (L. Danzer), проф. Н. Ривьеру (N. Rivier), д.ф.-м.н. В.Е. Дмитриенко, д.х.н. Н.А. Бульянкову, д.х.н. П.М. Зоркому, д.ф.-м.н. Н.П. Долбилину, д.ф.-м.н. С.С. Рышкову, к.х.н. А.В. Дзябченко, д.ф.-м.н. М.И. Самойловичу, д.т.н. В.С. Крапошину, академику РАН, д.х.н. Г.Ф. Терещенко, академику РАН, д.х.н. В.Я. Шевченко, д.ф.-м.н. И.Я. Ерухимовичу, д.х.н. И.А. Роновой, д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховскому, к.г.-м.н. Д.Г. Степенщиковой, д.ф.-м.н. А.Л. Рабиновичу. Автор благодарен заведующему лабораторией физической химии полимеров Института элементоорганических соединений имени А.Н. Несмиянова РАН академику РАН, д.ф.-м.н. А.Р. Хохлову, поддержавшему данное направление исследований, и всему коллективу лаборатории за доброжелательное отношение.

Глава 1. Тетраэдрические и тетракоординированные упорядоченные структуры и математические конструкции, необходимые для отображения их симметрии. Обзор

1.1. Системы Делоне. Теорема локальности

Всякая кристаллическая структура правильна, т.е. федоровская группа Φ движений 3-мерного евклидового пространства E^3 , совмещающих эту структуру с собой, дискретна и обладает конечной фундаментальной областью. Правильной системой точек (орбитой) называется совокупность точек, полученных из некоторой точки пространства некоторой группой движений пространства [137]. В дальнейшем под правильной системой будем понимать орбиту только относительно группы Φ . Любая кристаллическая структура, очевидно, состоит из конечного числа правильных систем атомов – орбит ее группы Φ .

Пусть r и R — некоторые вещественные положительные числа. (r, R) -системой называется множество точек пространства, удовлетворяющее следующим двум условиям: расстояние между любыми двумя различными его точками не меньше r ; внутри или на границе шара радиуса R , где бы ни взять в пространстве его центр, имеется хотя одна точка этого множества (рис.1.1, рис.1.2). Правильная система точек, в силу дискретности группы Φ и конечности ее фундаментальной области, является (r, R) -системой.

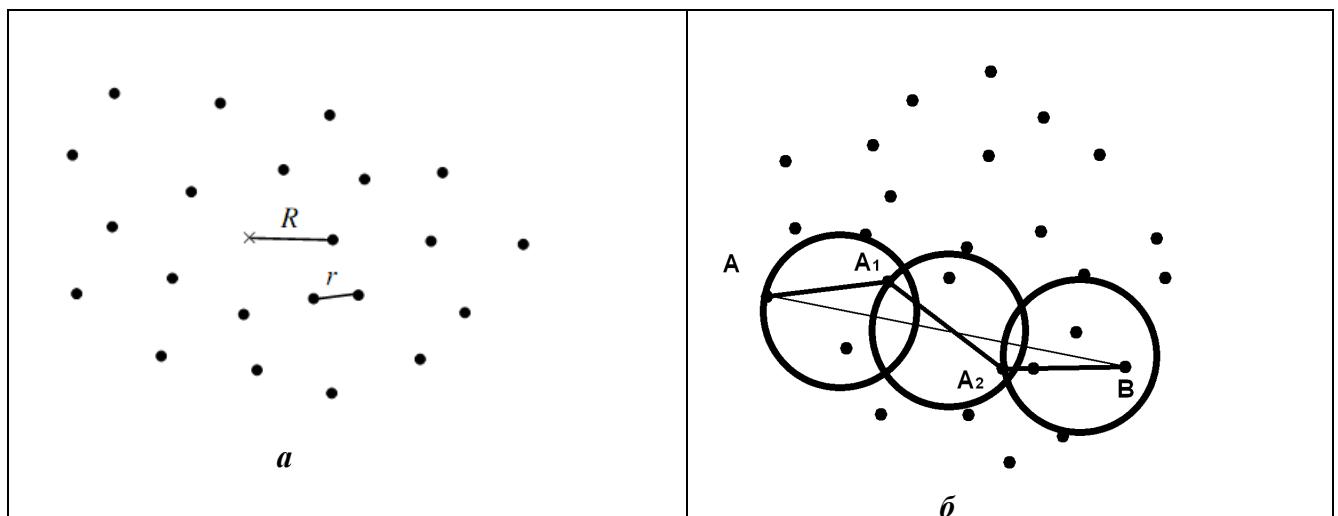


Рис.1.1 (адаптировано из [138]).
 (a) - пример (r, R) -системы точек на плоскости;
 (б) – $2R$ -цепочка в (r, R) -системе.

Возьмем произвольную точку системы, соединим ее со всеми остальными точками системы отрезками. Таким образом, получим для данной точки бесконечный «паук». Система будет правильной тогда и только тогда, когда для всех точек системы эти «пауки» конгруэнтны. Иначе говоря, для любых двух точек правильной системы существует движение, переводящее первую во вторую и совмещающее всю систему с собой.

Теорема локальности [137] посвящена доказательству того, что во всех трех пространствах (евклидовом, сферическом и Лобачевского) любого числа измерений для правильности (r, R) -системы достаточно конгруэнтности некоторых небольших конечных, так называемых стабильных «паучков» всех ее точек.

Пусть $S - (r, R)$ -система в пространстве E^n , где E^n - n -мерное евклидово пространство (либо Лобачевского, либо сферическое). Рассмотрим шар произвольного радиуса ρ с центром в точке системы. Множество точек из S , лежащих внутри или на границе этого шара, будем обозначать $S_A(\rho)$, а группу всех поворотов пространства E^n вокруг точки A , совмещающих $S_A(\rho)$ с собой, - $H_A(\rho)$. Множество $S_A(\rho)$ для каждого ρ , в силу r -свойства системы S , конечно. При $\rho = 2R$ множество $S_A(2R)$ расположено уже n -мерно, и можно показать, что группа $H_A(2R)$ конечна. Поскольку группа $H_A(2R)$ конечна и система S дискретна, то существует такое значение ρ_0 , что при $\rho \geq \rho_0$ группа $H_A(2R)$ конечна, а при $\rho < \rho_0$ группа $H_A(2R)$ бесконечна. Очевидно, что $r \leq \rho_0 < 2R$.

Для любой точки A из (r, R) -системы S существует такое число ρ_1 , ограниченное сверху в зависимости от r , R и n , что $H_A(\rho_1+2R) = H_A(\rho_1)$. В дальнейшем под значением ρ_1 для данной точки A будем понимать наименьшее для нее такое число. Множества точек $S_A(\rho_1+2R)$ и $S_A(\rho_1)$ будем называть стабильным и предстабильным множествами точки A , совокупность векторов, исходящих из точки A в каждую точку $S_A(\rho_1+2R)$ и $S_A(\rho_1)$, будем называть соответственно стабильным (предстабильным) паучком точки A . $2R$ -цепочкой в системе S мы называем последовательность точек из S такую, что расстояние между любыми двумя соседними в этой последовательности точками не превышает $2R$. Любые две точки A и B произвольной (r, R) -системы S можно соединить $2R$ -цепочкой (рис.1.1.6)

Teorema. Пусть $S - (r, R)$ -система точек в E^n . Для того чтобы система S была правильной, достаточно, чтобы стабильные паучки всех ее точек были конгруэнтны, и тогда система S однозначно задана паучком.

Доказательство теоремы. Пусть в (r, R) -системе стабильные паучки всех ее точек конгруэнтны. Рассмотрим любые две точки A и B системы S и обозначим через d движение пространства, переводящее стабильный паучок P_A в стабильный паучок P_B . Докажем, что

при движении δ произвольная точка С из S переходит в некоторую точку D из S . Для этого точки A и C соединим 2R-цепочкой AA₁, A₂... A_iC. Точка A, принадлежит S_A и поэтому при движении δ точка A₁ перейдет в некоторую точку B₁ из S_B . Очевидно, что шар радиуса r_1 с центром в точке A₁ лежит в шаре радиуса r_1+2R с центром в точке A, а шар радиуса r_1 с центром в B₁ лежит в шаре радиуса r_1+2R с центром в B. Поэтому предстабильный паучок P'_{A1} , при движении δ переходит в предстабильный паучок P'_{B1} . Но в таком случае и стабильный паучок P_{A1} при движении δ перейдет в стабильный паучок P_{B1} , что следует из конгруэнтности стабильных паучков и из того, что всякий поворот предстабильного паучка в себя совмещает с собой и стабильный паучок этой точки.

Таким образом, движение δ , которое переводило P_A в P_B , переводит P_{A1} в P_{B1} . Повторяя те же рассуждения для точек A₁ и B₁, мы убедимся, что движение δ переводит точку A₂ ∈ S_A в точку B₂ ∈ S_B , предстабильный паучок P'_{A1} в предстабильный паучок P'_{B1} и следовательно, стабильный паучок P_{A2} в стабильный паучок P_{B2} , и т. д. Поэтому движение δ переводит точку C ∈ S в некоторую точку D ∈ S . Так как движение δ^{-1} переводит стабильный паучок P_B в стабильный паучок P_A , то на основании аналогичных рассуждений движение δ^{-1} любую точку D ∈ S переводит в некоторую точку C ∈ S . В итоге мы получаем, что рассматриваемое движение δ совмещает (r, R)-систему S с собой. Так как A и B — любые две точки из S, то доказательство теоремы завершено.

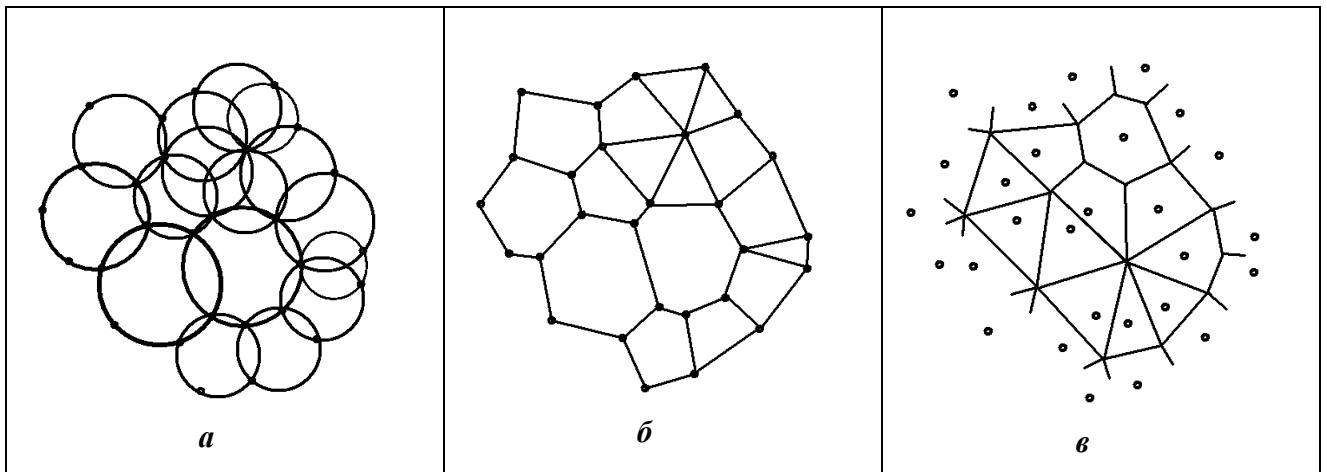


Рис.1.2 (адаптировано из [138]).

(**а**), (**б**) Разбиение Делоне (r, R)-системы;

(**в**) Разбиение этой же (r, R)-системы, дуальное разбиению Делоне (“разбиение Дирихле”). Дуальными называются разбиения, в котором ячейке исходного разбиения соответствует вершина дуального, и наоборот.

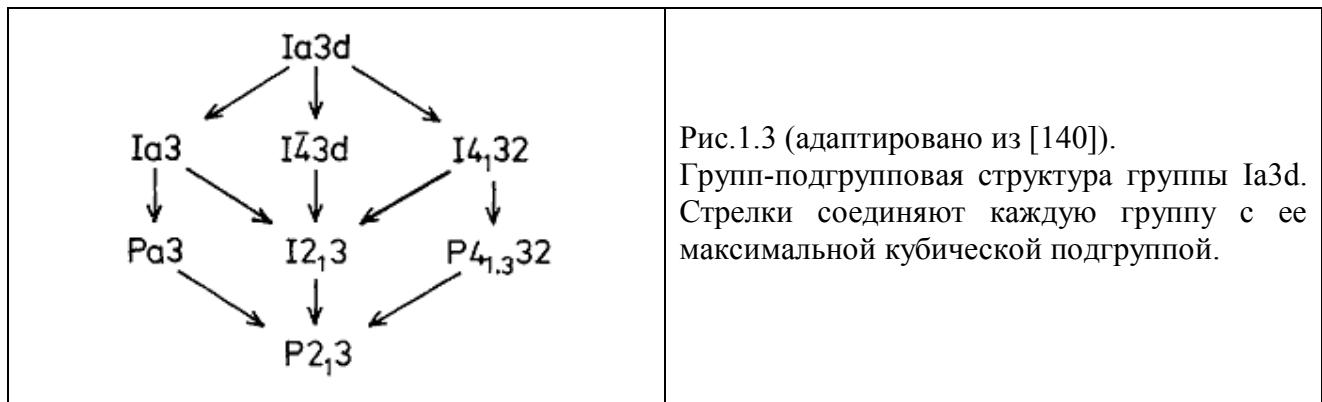
1.1.1. Кристаллографические разбиения 3-мерного евклидова пространства.

Федоровские группы и конструкции алгебраической геометрии

Даже традиционные кристаллографические конструкции можно рассматривать как частные случаи конструкций алгебраической геометрии. Например, пусть $G=SL(n+1, Q_p)$ – специальная линейная группа над полем Q_p , а именно множество всех матриц $(n+1) \times (n+1)$ с определителем, равным 1, элементами которых являются числа из поля Q_p . Обозначим через B группу матриц из $SL(n+1, Z_p)$, в которых элементы $a_{ij} \in pZ_p$ для $i < j$, где Q_p и Z_p – локальные поля, p – простое число. Если N – подгруппа G , состоящая из матриц, у которых в каждом столбце и в каждой строке только один ненулевой элемент, $B \cap N$ – пересечение групп B и N , то при $n = 3$ фактор-группа $W = N/(B \cap N)$ изоморфна федоровской группе $Fm\bar{3}m$. При этом группа $Fm\bar{3}m$ порождается множеством S из 4 плоскостей отражения, 3 из которых принадлежат точечной группе $\bar{4}3m$ [139].

1.1.2. Кристаллографические объединения линейных подструктур (стержней)

Федоровская группа может быть факторизована в виде “произведения” 1-мерной группы трансляций с определенной подгруппой этой федоровской группы, рис.1.3.



Это определяет возможность представления кристаллической структуры в форме объединения стержней (спиралей), рис.1.4.

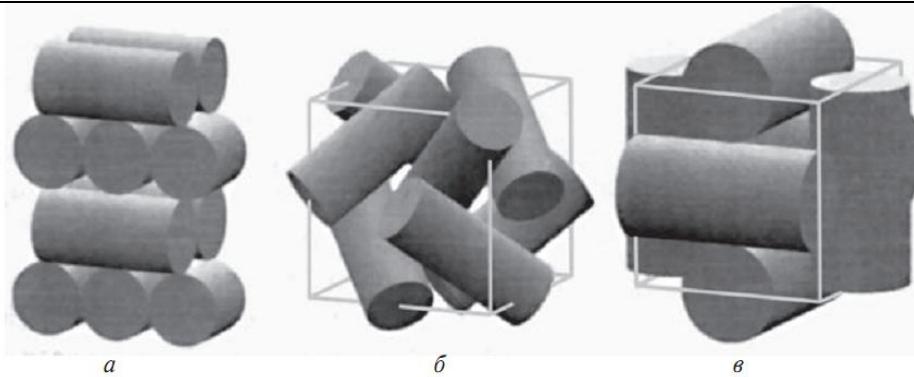


Рис. 1.4 (адаптировано из [141]).

- (*а*) Упаковка стержней; ее пространственная группа симметрии $P4_2/mmc$; (*б*) элементарная ячейка упаковки стержней с симметрией $Ia3d$, стержни располагаются вдоль непересекающихся осей третьего порядка; это наиплотнейшая из всех упаковок стержней; (*в*) элементарная ячейка упаковки стержней с симметрией $Im\bar{3}$.

1.2. Полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала

При плотнейшей случайной упаковке шаров одинакового радиуса возникают триангулированные равнореберные полиэдры пустоты (полиэдры Бернала), рис.1.5.

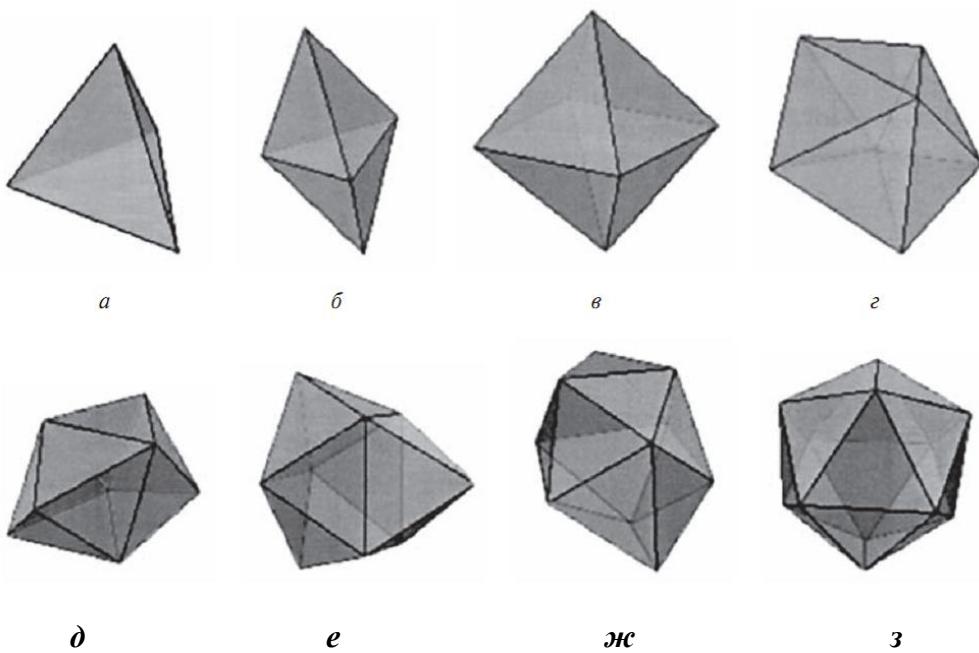
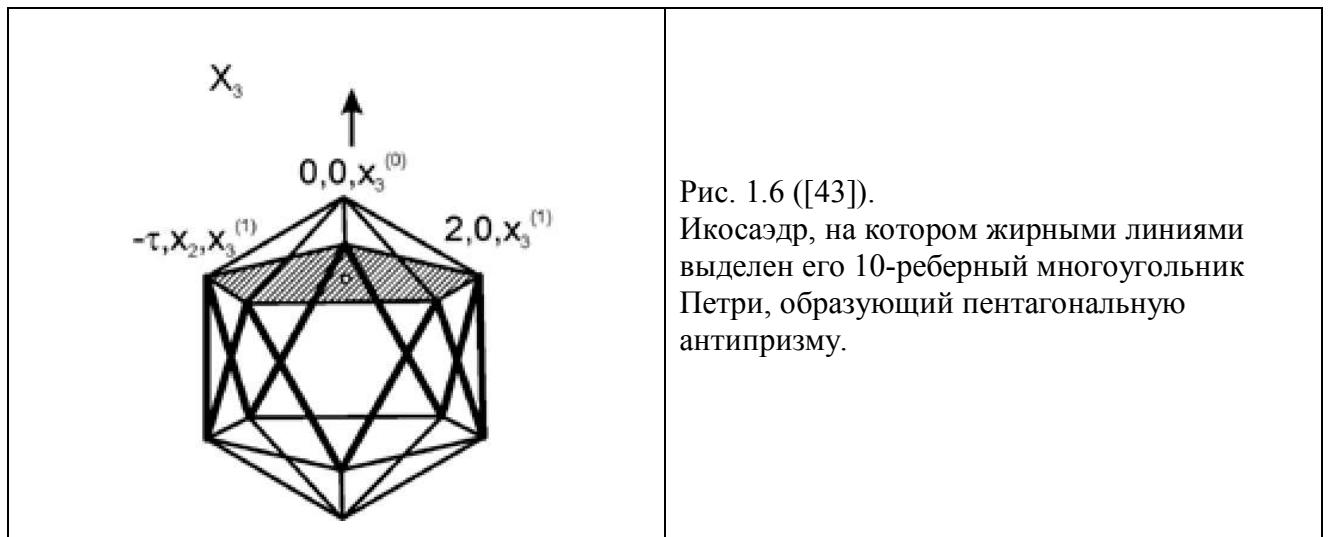


Рис. 1.5 (адаптировано из [141]). Дельтоэдры Бернала: (*а*) тетраэдр: 4 вершины, 4 грани; (*б*) тригональная бипирамида: 5 вершин, 6 граней; (*в*) октаэдр: 6 вершин, 8 граней; (*г*) пентагональная бипирамида: 7 вершин, 10 граней; (*д*) плосконосый дисфеноид (также называемый додекаэдром Сиамеса): 8 вершин, 12 граней; (*е*) трижды расширенная треугольная призма (треугольная призма, покрытая тремя квадратными пирамидами): 9 вершин, 14 граней; (*ж*) циклически удлиненная квадратная дипирамида (квадратная антипризма, покрытая двумя квадратными пирамидами): 10 вершин, 16 граней; (*з*) икосаэдр: 12 вершин, 20 граней.

1.3. N-мерные платоновы тела (политопы) и соты

Обозначаемый символом Шлефли $\{p,q,r\}$ четырехмерный полиэдр (политоп) составлен из правильных Платоновых тел (ячеек) $\{p,q\}$ таким образом, что каждая грань $\{p\}$ принадлежит двум ячейкам, а каждое ребро – r ячейкам. Расположение ячеек при вершине $\{p,q,r\}$ соответствует расположению граней полиэдра $\{q,r\}$, вершины которого – середины ребер, выходящих из данной вершины. Полиэдр $\{q,r\}$ – вершинная фигура политопа, вершины дуального ему полиэдра $\{r,q\}$ являются центрами ячеек $\{p,q\}$, сходящихся у каждой вершины политопа. Для политопа $\{p,q,r\}$ возможно лишь единственное "вырождение" в трехмерную мозаику (соты) $\{4,3,4\}$, представляющую собой разбиение E^3 при котором каждое ребро принадлежит 4^м кубам $\{4,3\}$. Символ $\{p,q\}$ полиэдра определяет и его многоугольник Петри – "зигзаг" из h ребер ($\cos^2 \pi/h = \cos^2 \pi/p + \cos^2 \pi/q$), в котором любые две, но не три последовательные стороны принадлежат одной грани [24]. Например, для икосаэдра $\{3,5\}$ многоугольник Петри – это $h = 10$ "боковых" ребер пентагональной антипризмы (рис.1.6).



Многоугольник Петри политопа $\{p,q,r\}$ – это последовательность ребер, в которой любые три, но не четыре принадлежат многоугольнику Петри ячейки $\{p,q\}$ (рис.1.7).

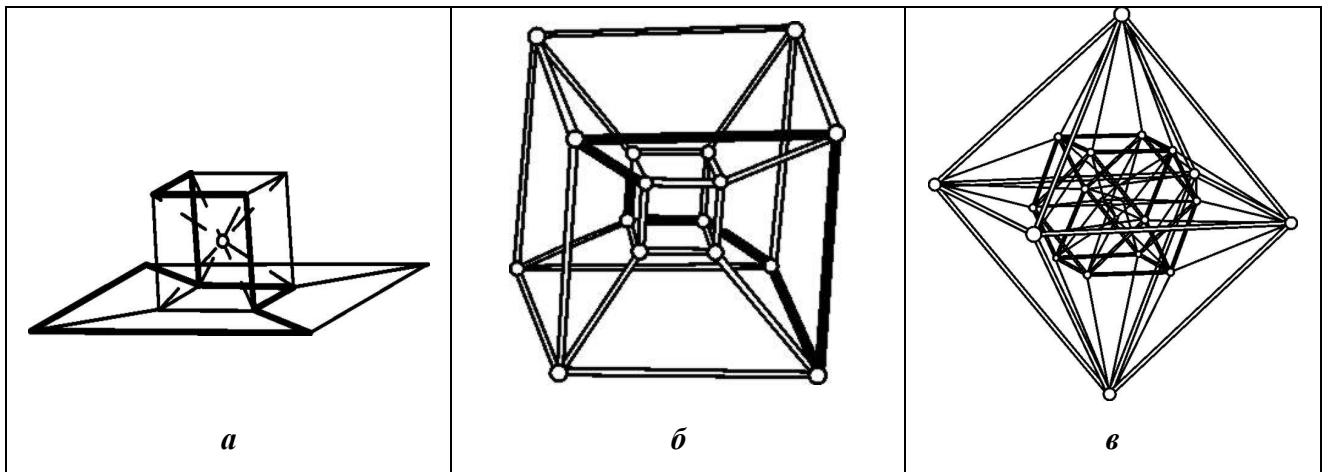


Рис. 1.7. Отображения политопов в E^3 [33].

- (а) Куб $\{4,3\}$ и его проекция на плоскость в форме диаграммы Шлегеля. 6-реберный многоугольник Петри куба и его диаграммы Шлегеля показаны жирными линиями.
- (б) Проекция политопа $\{4,3,3\}$ в E^3 , на которой жирными линиями выделен его 8-реберный многоугольник Петри.
- (в) Проекция политопа $\{3,4,3\}$ в E^3 как объединение сечений гиперплоскостями E^3 : внешний и внутренний октаэдры и «экваториальный» кубооктаэдр.

Полиэдр $\{p,q\}$ может вкладываться как ячейка и в обычные 3-мерные гиперболические соты: $\{3,5,3\}$, $\{4,3,5\}$, $\{5,3,4\}$, $\{5,3,5\}$. Если $\{p,q\}$ двумерная евклидова мозаика, получаем особые гиперболические соты: $\{4,4,3\}$, $\{6,3,3\}$, $\{6,3,4\}$, $\{6,3,5\}$, в которых 2-мерные мозаики (рис.1.8) $\{4,4\}$ и $\{6,3\}$ трансформируются в сферы ∞ радиуса, не являющиеся гиперболическими плоскостями, погруженными в H^3 . Последние представляют собой более сложные объекты, именуемые орисферами, чья геометрия совпадает с евклидовыми плоскостями E^2 [12], поэтому “ячейку” в $\{6, 3, 3\}$ можно рассматривать как евклидову мозаику $\{6,3\}$.

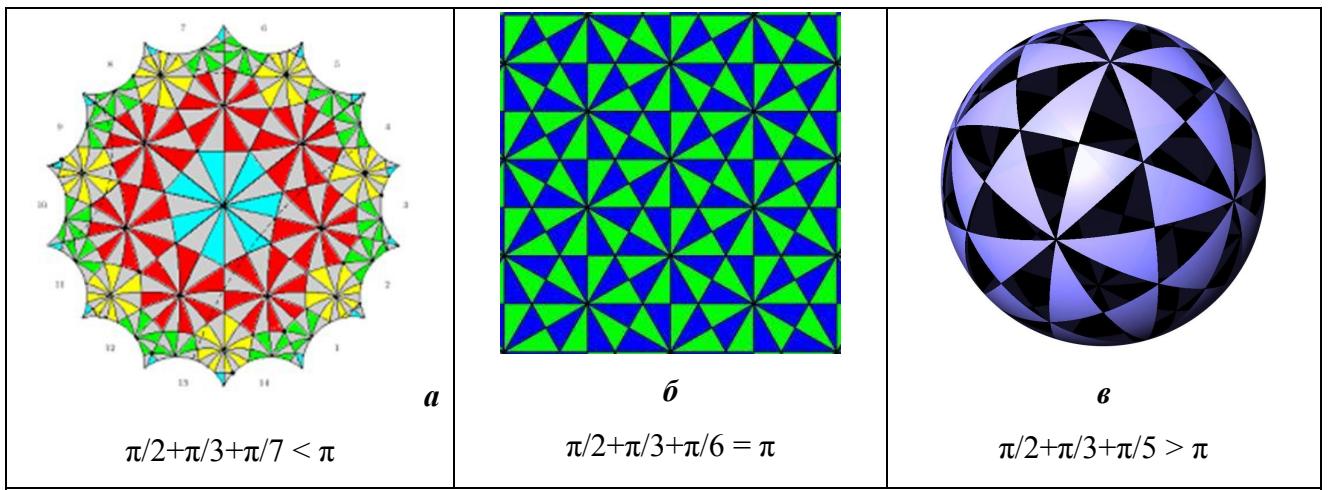


Рис.1.8 ([142]). Гиперболическая (а), евклидова (б) и сферическая (в) мозаики, порождаемые отражениями относительно сторон треугольника с углами $\pi/2, \pi/3$ (а) $\pi/7$; (б) $\pi/6$; (в) $\pi/5$.

Двугранный угол правильного тетраэдра $70.53^\circ < 72^\circ = 360^\circ/5$, поэтому разбиение E^3 на правильные тетраэдры не реализуется. В E^3 угловой дефицит объединенных тетраэдров ликвидируется за счет отказа от их правильности, но в 3-мерном положительно искривленном пространстве S^3 этот дефицит ликвидируется за счет кривизны S^3 , подобно тому, как невозможное на плоскости E^2 разбиение на правильные пентагоны возможно в додекаэдре на сфере S^2 , погруженной в E^3 (рис.1.9).

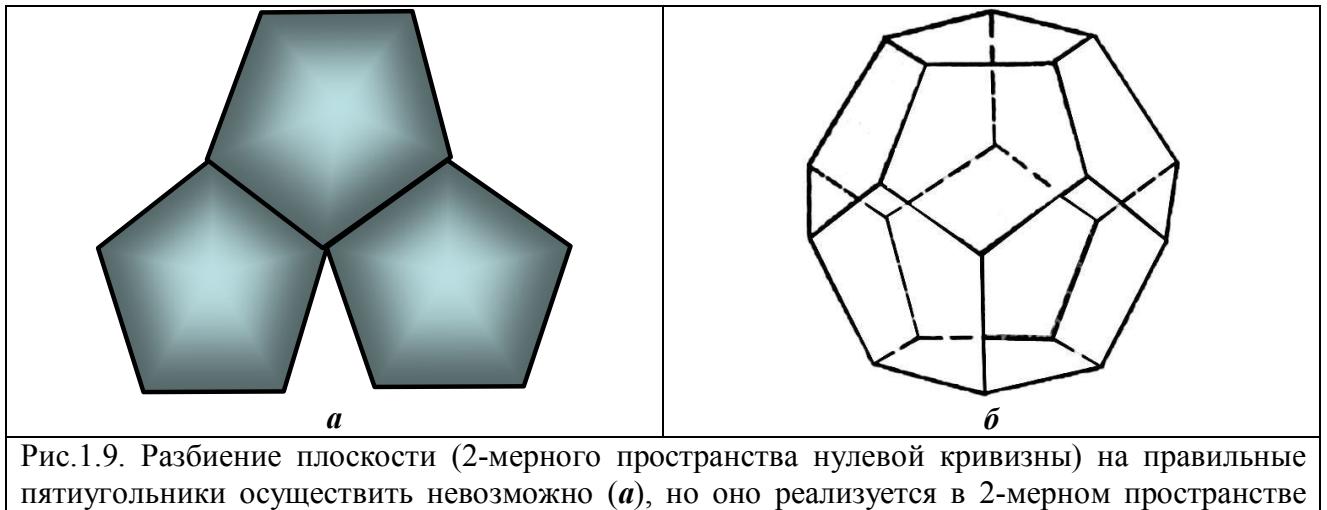


Рис.1.9. Разбиение плоскости (2-мерного пространства нулевой кривизны) на правильные пятиугольники осуществить невозможно (*a*), но оно реализуется в 2-мерном пространстве постоянной положительной кривизны – на сфере S^2 для додекаэдра (*б*).

Если обычная сфера S^2 определяется уравнением $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = r^2$, то сфера S^3 – уравнением $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = r^2$, или в 4-мерных сферических координатах:

$$\begin{array}{ll} x_1 = r \cdot \cos\theta \cdot \cos\varphi & x_2 = r \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \\ x_3 = r \cdot \cos\omega \cdot \sin\varphi & x_4 = r \cdot \sin\omega \cdot \sin\varphi \end{array} \quad (1.1)$$

Здесь r – радиус-вектор, $\theta \in [0, 2\pi]$, $\varphi \in [0, \pi/2]$, $\omega \in [0, 2\pi]$.

1.3.1. Политоп $\{3,3,5\}$ и алмазоподобный полурегулярный политоп $\{240\}$

Разбиение трехмерной сферы S^3 (погруженной в E^4 и имеющей с E^3 лишь одну общую точку) на 600 правильных тетраэдров образуют 4-мерный аналог икосаэдра – политоп $\{3,3,5\}$ [24]. Он содержит 600 ячеек, 1200 треугольных граней, 720 ребер и 120 расположенных на S^3 вершин, которым соответствуют 120 кватернионов, образующих группу $[3,3,5]$ порядка 14400. Политоп $\{3,3,5\}$ и дуальный к нему политоп $\{5,3,3\}$ (4-мерный аналог додекаэдра) отображаются на себя группой $Y'xY$ порядка 14400. Структуру группы $[3,3,5]$ определяют соотношения:

$$[3,3,5] \supset [3,3,5]^+ = (Y' \times Y')/Z_2 \supset [3,5]^+ \times [3,5]^+, \quad (1.2)$$

где \times – символ прямого произведения групп, $[3,5]$ - группа отражений икосаэдра, $Y = [3,5]^+ = (2,3,5)$ – группа вращений икосаэдра с кодом: $R^2 = S^3 = T^5 = RST = 1$; $Y' = <2,3,5>$ - бинарная группа икосаэдра с кодом $S^3 = T^5 = (ST)^2$; $R = R_1R_2$, $S = R_2R_3$, $T = R_3R_1$; $[3,3,5]^+$ – группа вращений $\{3,3,5\}$. Сечения, начиная с вершины, политопа $\{3,3,5\}$ “трехмерной плоскостью” представляют собой икосаэдр, додекаэдр, икосидодекаэдр, рис.1.10. В табл.1.1 представлены координаты полиэдров, получающиеся в этих сечениях.

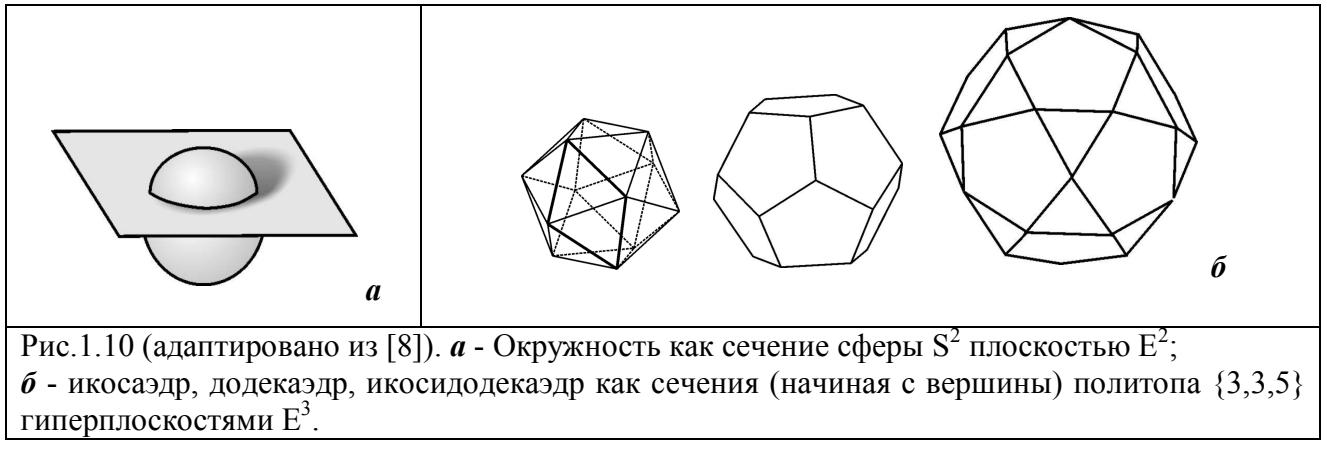


Рис.1.10 (адаптировано из [8]). **a** - Окружность как сечение сферы S^2 плоскостью E^2 ;
б - икосаэдр, додекаэдр, икосидодекаэдр как сечения (начиная с вершины) политопа $\{3,3,5\}$ гиперплоскостями E^3 .

Таблица 1.1. Сечения политопа $\{3, 3, 5\}$, начиная с вершины [24].

Сечения $\{3,3,5\}$	x_4	(x_1, x_2, x_3)	Количество вершин	Полиэдр
0_0	2	$(0,0,0)$	1	точка
1_0	τ	$(1,0, \tau^{-1})$	12	икосаэдр
2_0	1	$(1,1,1), (\tau, \tau^{-1}, 0)$	20	додекаэдр
3_0	0	$(0,0,0)$	30	икосидодекаэдр

Для группы $[3,3,5]$ политопа $\{3,3,5\}$ и ее подгруппы вращений $[3,3,5]^+$ справедливы следующие коды :

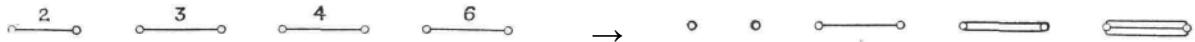
$$(R_1 R_2)^3 = (R_2 R_3)^3 = (R_3 R_4)^5 = Q^6 = P^{10} = (PQ^3)^2 = 1 \quad (1.3)$$

$$(R^3 S^5)^2 = (R^5 S^3)^2 = R^{15} = S^{15} = Z, \quad R^3 \leftrightarrow S^3, R^5 \leftrightarrow S^5,$$

где , R_1, R_2, R_3, R_4 – порождающие плоскости отражений $R_1R_2R_4 = Q \subset [3,3,5] \supset P = R_1R_3R_4$; $R_1R_2R_3R_4 = R \subset [3,3,5]^+ \supset S = R_2R_3R_4R_1$, $15 = h/2$, $h = 30$ – число ребер в многоугольнике Петри политопа $\{3,3,5\}$; элемент Z порядка 2 содержится и в $[3,3,5]^+$, и в Y' [22]. В неприводимые системы образующих группы $[3, 3, 5]$ входят лишь элементы Q и P или $Q(P)$ и $R(S)$.

1.4. Решетки (системы) корней, диаграммы Коксетера – Дынкина, группы Вейля

Группа отражений может быть компактно описана с помощью *диаграммы Коксетера–Дынкина*, представляющей собой граф, каждая вершина которого соответствует отображающей плоскости и две вершины соединены ребром с отметкой p , если угол между соответствующими плоскостями равен π/p . Для ребер с малыми значениями p обычно употребляются сокращения:



Для кристаллографических групп отражений p принимает значения только 2, 3, 4, 6, так как лишь эти группы связаны с решетками. Каждая отражающая гиперплоскость определяется перпендикулярным к ней вектором, называемым *корневым вектором* (или просто *корнем*). Корневые векторы, перпендикулярные к стенкам фундаментальной области, называются *простыми* или *фундаментальными корнями*, а все множество корней называется *системой корней*. Решетка, порожденная системой корней, называется *решеткой корней*, фундаментальные корни образуют ее целочисленный базис. Обратно, если задана решетка, ее *корень (корневой вектор)* определяется как вектор r , для которого отражение $x \rightarrow x - 2(x \cdot r / r \cdot r)r$ является симметрией решетки. Если решетка целочисленна и унимодулярна, то корни суть в точности векторы решетки нормы 1 и 2, они называются соответственно *короткими* и *длинными* корнями решетки.

Все неразложимые конечные системы корней, а, следовательно, и все неразложимые конечные кристаллографические группы отражений представлены на рис.1.11. В первом столбце приводится название системы (решетки) корней, во втором – группа отражений, отображающая данную решетку на себя, а в третьем - порядок этой группы. В четвертом столбце приведены диаграммы Коксетера-Дынкина, задающие простые корни кристаллографических решеток, отражения относительно которых порождают соответствующую конечную группу

отражений. Эта группа "размножает" множество простых корней до всей системы корней Δ . В пятом столбце показано "вложение" диаграммы Коксетера-Дынкина некристаллографических решеток H_2 , H_3 , H_4 в диаграммы решеток A_4 , D_6 , E_8 . Длины корней определяются соглашением, что k -кратное ребро, стрелка на котором (если она есть) направлена от r к s , задает условие $N(r) = kN(s)$. Произведение всех порождающих отражений называется *элементом Коксетера*, элемент Коксетера имеет порядок h , называемый *числом Коксетера*.

Каждый корень β в системе корней с базисом Δ может быть представлен в виде: $\beta = \sum_{\alpha} k_{\alpha} \alpha$, $\alpha \in \Delta$, где k_{α} – неотрицательные целые числа. Корень $\beta \in \Delta$ называется положительным (относительно Δ) при $k_{\alpha} \geq 0$ и отрицательным при $k_{\alpha} < 0$. При фиксированном Δ имеем:

$$\Delta = \Delta^+ \cup \Delta^- \quad (1.4),$$

где $\Delta^- = -\Delta^+$, $\Delta^+(\Delta^-)$ – система положительных (отрицательных) корней. Общее число корней в Δ равно nh , поэтому, для решеток A_n , D_n и E_n (когда все корни имеют одну и ту же длину) nh равно контактному числу – числу шаров решетки касающихся каждого шара. Системы корней A_2 , B_2 , G_2 , B_3 , A_3 изображены на рис.1.11. Пример реализации диаграммы Коксетера-Дынкина для некристаллографической системы H_3 приведен на рис.1.12. Бесконечная (*евклидова*) группа отражений, иногда называемая *аффинной группой Вейля*, получается присоединением всех сдвигов на корневые векторы. Это также группа отражений, диаграмма которой получается добавлением еще одной вершины (называемой *расширяющей вершиной*) к диаграмме для конечной группы [16].

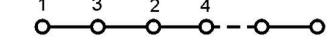
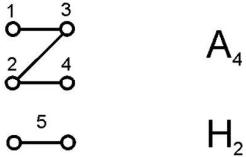
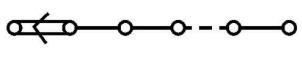
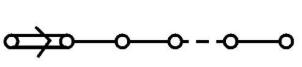
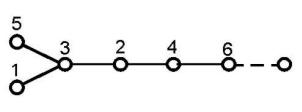
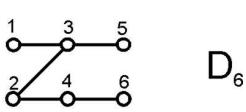
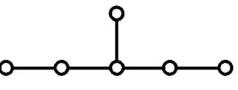
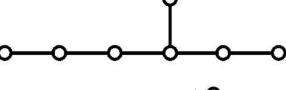
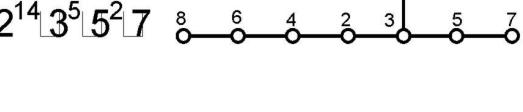
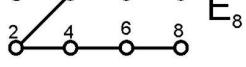
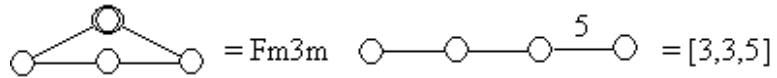
Система (решетка) корней	Обозначение группы отражений	Порядок группы	Диаграмма Коксетера- Дынкина	Вложение решеток H_n в A_4, D_6, E_8
A_n (A_n)	$[3^{n-1}]$	$(n+1)!$		
B_n (Z^n)	$[3^{n-2}, 4]$	$2^n n!$		
C_n (D_n)	$[3^{n-2}, 4]$	$2^n n!$		$[5]$
D_n (D_n)	$[3^{n-3,1,1}]$	$2^{n-1} n!$		
G_2 (A_2)	$[6]$	12		
F_4 (D_4)	$[3,4,3]$	1152		$[3,5]$
E_6 (E_6)	$[3^{2,1,1}]$	$2^7 [3^4] 5$		
E_7 (E_7)	$[3^{3,2,1}]$	$2^{10} [3^4] 5 [7]$		
E_8 (E_8)	$[3^{4,2,1}]$	$2^{14} [3^5] 5^2 [7]$		
				H_4
				$[3,3,5]$

Рис.1.11. Конечные группы отражений, соответствующие им диаграммы Коксетера-Дынкина и вложения некристаллографических систем H_n , $n = 2, 3, 4$ в кристаллографические системы A_4, D_6, E_8 . В 4-м и 5-м столбцах одинаковые узлы диаграмм нумеруются одинаковыми цифрами [16].

Симплекс E^3 – правильный тетраэдр $\{3,3\}$, который отображается на себя группой отражений $[3,3] = \bar{4}3m$ с диаграммой Коксетера-Дынкина:  При добавлении еще одной порождающей гиперплоскости, обозначаемой на диаграмме двойным кружком, $[3,3]$ может быть расширена и до бесконечной евклидовой группы отражений – федоровской группы $Fm\bar{3}m$ и до (некристаллографической) точечной группы отражений $[3,3,5]$ решетки H_4 (политопа $\{3,3,5\}$):



ГЦК-решетка совпадает с решеткой корней $A_3=D_3$, 12 векторов ее первой координационной сферы образуют систему корней D_3 , а 18 векторов второй – систему корней C_3 .

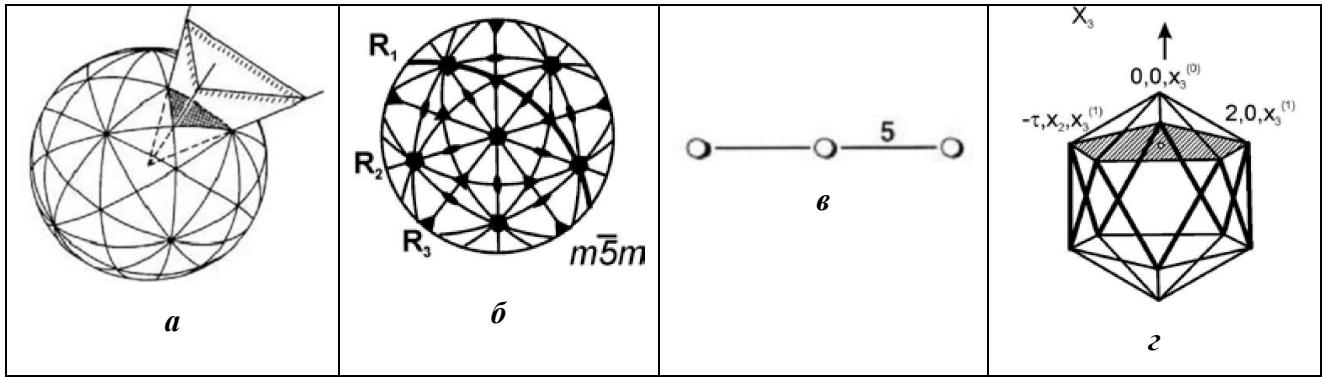


Рис. 1.12 ([16, 43]). (а), (б) Стереографическая проекция группы икосаэдра, порождаемой плоскостями отражений R_1, R_2, R_3 ; (в) диаграмма Коксетера-Дынкина для группы икосаэдра; (г) Сечение икосаэдра плоскостью перпендикулярной пятерной оси. Его 10-реберный многоугольник Петри показан жирными линиями.

($n+1$) – мерная решетка, составленная из максимально близко расположенных копий определенной n -мерной решетки, называется слоистой решеткой и обозначается Λ_{n+1} . Например, если к одномерной решетке Z , состоящей из шаров с центрами в четных целых точках, максимально близко расположены такие же решетки, то мы получим гексагональную решетчатую упаковку A_2 . Если взять слой шаров с центрами в A_2 и максимально близко к нему расположить такой же слой, далее – другой слой на том же расстоянии и т.д., то мы получим ГЦК-решетку $A_3=D_3$ (рис.1.13). Слоистые решетки $\Lambda_1, \Lambda_2=A_2, \Lambda_3=A_3, \Lambda_4=D_4 \dots \Lambda_n \dots \Lambda_{24}$ образуют “главную последовательность” сечений 24-мерной решетки Лича Λ_{24} , эти решетки имеют наибольшее контактное число среди решеток Λ_n , т.е. дают плотнейшие слоистые упаковки [16].

Абстрактная группа Вейля $W(\Phi)$ есть конечная подгруппа $W_\alpha \subset W$ группы $GL(E)$, порожденная отражениями $\tau_\alpha (\alpha \in \Phi)$. Выбор борелевской подгруппы, содержащей тор T , приводит к фиксации как выбора системы положительных корней, так и базы $\Delta_\alpha (\alpha_1 \dots \alpha_l)$. Абстрактные веса в вещественном пространстве E образуют свободную абелеву группу ранга l , которая порождает решетку Λ . Если выбран базис для решетки корней Λ_r , то Λ обладает базисом, состоящим из фундаментальных доминантных весов вида

$2(\lambda_i, \lambda_j)(\alpha_i, \alpha_j) = \delta_{ij}$. Решетка абстрактных весов обладает упорядочением по закону $\lambda > \mu$, где λ – старший вес, а $(\lambda - \mu)$ – сумма (возможно, нулевая) положительных корней [30].

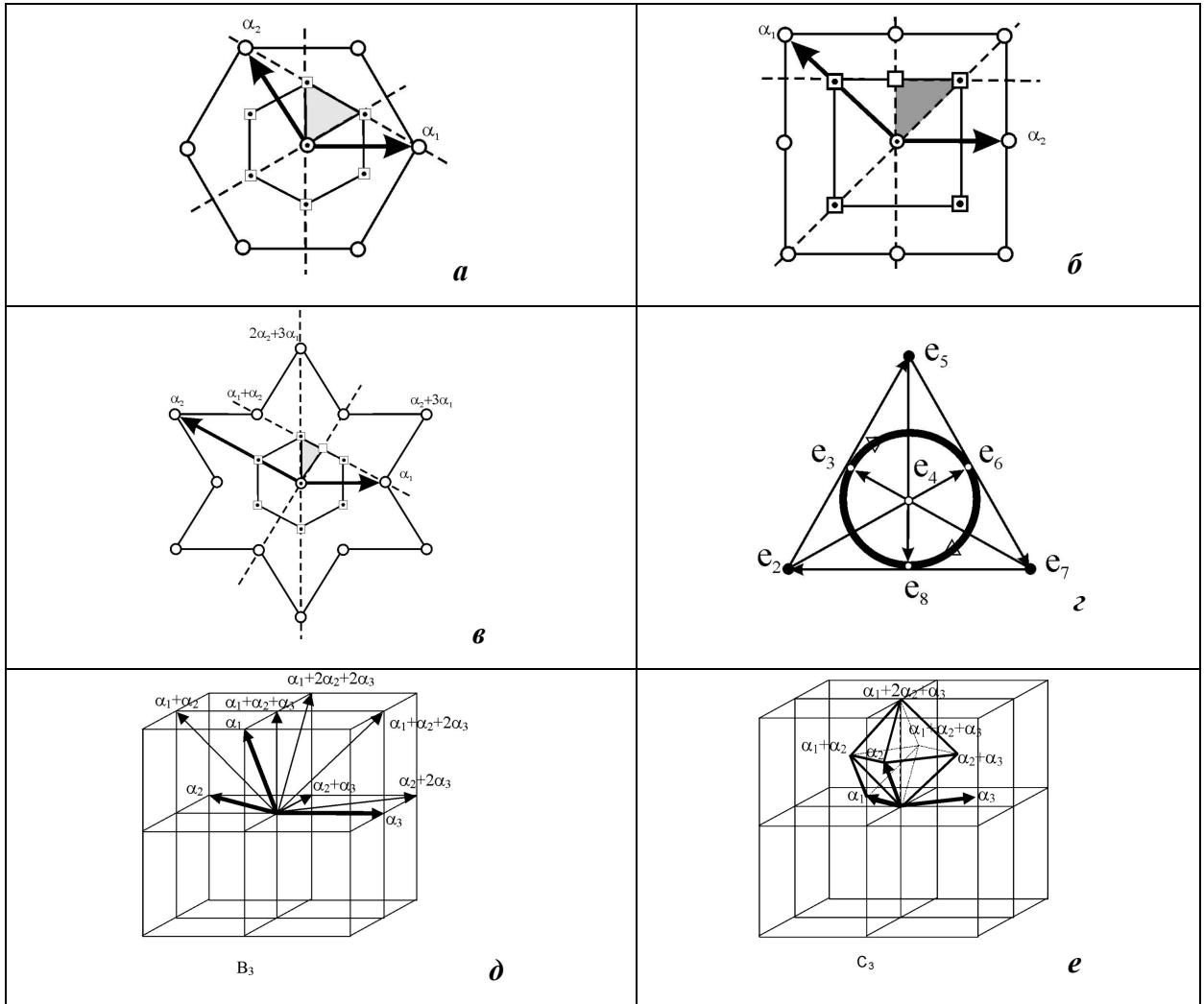


Рис. 1.13. Системы корней.

a, б, в - системы корней A_2 , B_2 , G_2 . Фундаментальный симплекс группы отражений зачернен, плоскости отражений, образующие его стенки, показаны пунктиром, а плоскость, образующая его крышу, - жирным пунктиром. Вершины многоугольника Дирихле начала координат показаны квадратиками [28, 33].

г - схема, задающая таблицу умножения базисных векторов октавы (направление стрелок указывает знак произведения).

д, е - подсистемы положительных корней B_3 и C_3 , содержащиеся в примитивной и гранецентрированной кубических решетках. Без вектора α_3 подсистема C_3 определяет одношапочный октаэдр – октаэдр с тетраэдром $(0, \alpha_1, \alpha_1 + \alpha_2, \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)$, стоящим на его грани.

Простые (фундаментальные) корни на всех рисунках показаны жирными стрелками.

Дуальная система корней (двойственное пространство) выделяется заданием функции для всех α^* , принимающей значение 2 для α ($\alpha \in \Phi$) и значение 0 для остальных корней Λ , что связывает длинные и короткие корни целочисленных базисов унимодулярных решеток (все решетки вида Z^n порождаемые алгебрами B_n и C_n , а также решетка E_8). Группа $W=W(\Phi)$

переставляет простые корни однотранзитивно и каждый корень принадлежит по крайней мере одной базе. Группой Вейля называется группа, образованная элементами, которые сохраняют соответствующее пространство автоморфизмами вида $\alpha\alpha^{-1}$, так что группа Вейля максимального тора совпадает с группой Вейля группы G . Группы Вейля системы Титса рангов 1,2 называются группами Коксетера, которые используются при рассмотрении линейных преобразований евклидовых пространств, порождаемых отражениями в гиперплоскостях (последние соотносятся с корневыми векторами соответствующих алгебр).

Фундаментальные области групп Коксетера соответствуют замкнутым камерам Вейля, а именно объединению неподвижных плоскостей отражения (разбивающих пространство на симплициальные конуса). Число камер Вейля равно порядку группы, а их геометрия описывается с использованием графов Коксетера, в которых стенкам камеры сопоставляются вершины графа (при этом могут использоваться отражения в стенах различных камер — неканонические диаграммы Дынкина).

Переход от конечной группы к бесконечной, (аффинная группа Вейля или евклидова группа отражений) осуществляется присоединением всех сдвигов на корневые вектора, на диаграмме конечной группы это выглядит как добавления еще одной вершины. Обратный переход осуществляется удалением одного из концов (из набора специальных векторов-корней), число которых равно $d = \det\Lambda$ для решетки корней соответствующей алгебры. Если выделено множество корней Δ (база) $\{\alpha_1 \dots \alpha_i\}$, для которого каждый корень в пространстве E может быть представлен в виде $\alpha = \sum c_i \alpha_i$ (единственное представление), где c_i числа одного знака, корни называются простыми а группа Вейля $W(\Phi)$ переставляет корни базы однотранзитивно [30].

Как известно, группы Ли (G) в первом приближении коммутативны [30] и изоморфны подходящей векторной группе, поэтому в такой группе можно выделить коммутативную подгруппу - максимальный тор, которому в алгебре Ли (g) соответствует картановская подалгебра (максимальная коммутативная подалгебра). Таким образом, поскольку коммутативные части групп и алгебр (здесь и далее рассматриваются только алгебры Ли) определяют большую часть их свойств, в том числе разложения, определяются выделением, принадлежащих указанным группам подгрупп Бореля (B), содержащих подгруппы тора и особенностями действия тора (или его централизатора) на многообразии G/B . Важным свойством борелевых подгрупп, действующих на многообразии G/B , является то, что любой максимальный тор имеет на таком многообразии неподвижную точку, по крайней мере, одну или конечное число, – тогда тор называется регулярным или сингулярным, если такое число бесконечно (например, на оси вращения имеется бесконечное число неподвижных точек). Многообразие G/B является наибольшим однородным пространством группы G ,

обладающим структурой проективного многообразия, при этом, все однородные пространства по своему строению квазипроективны (в них можно выделить открытые аффинные подмногообразия). Если размерность $G/B=1$, тор T оставляет неподвижными 2 точки на G/B , и не менее 3 точек, если $G/B>1$.

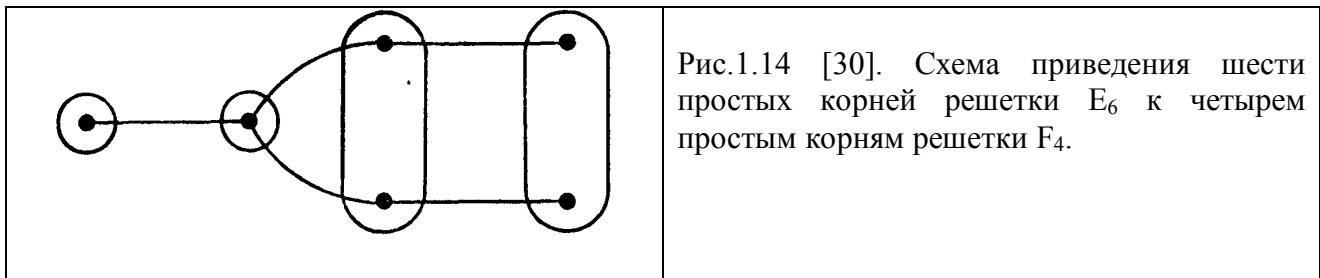
Фактор-группы централизаторов тора по центру не только порождают редуктивные группы, но и фактически являются подгруппами группы $PGL(2,K)$. Различные подгруппы группы $PGL(2,K)$ над конечными полями, в свою очередь, могут быть реализованы в форме конфигураций проективных геометрий (конечных, как правило). К редуктивным группам, которые строятся из произведения коммутанта и своего центра, относится, в частности, любой тор (если тор регулярен, его централизатор также тор) [30].

Необходимость использования групп тора обусловлено не только их связью с борелевскими подгруппами, но и в связи с задачей разложения алгебраических групп над различными полями, в частности, над конечными расширениями полей Галуа [30]. Алгебраическая группа (связная) G называется k -разложимой, если некоторый максимальный тор в ней разложим над k (k -тор, где k - произвольное подполе алгебраически замкнутого поля комплексных чисел C). Можно также показать, что для рассматриваемых групп всегда существует конечное расширение Галуа поля k , над которым k -тор становится разложимым. В случае алгебраических групп, таких как k -групп, необходимо, чтобы группа G и морфизмы $G \times G \rightarrow G$ и $G \rightarrow G$ были определены над k .

Следовательно, рассмотрение разложимости алгебраических групп и квазиразложимости, в случае полупростых алгебр, редуктивных групп, можно свести к изучению разложимости их торов (следовательно, коммутативной части групп). Ситуация аналогична с построением точечных групп симметрии для кристаллов, поскольку, в общем случае, элементы трансляций и вращений группы движений не обязательно коммутируют. Понятие квазиразложимости связано с теми случаями, когда группа G не является k -разложимой, но содержит определенную над k борелевскую подгруппу. В данном случае максимальный k -разложимый тор S имеет своим централизатором также тор T , который принадлежит некоторой борелевской подгруппе B . При этом корни из системы Φ относительно T становятся зависимыми, если их ограничить на S , а их k -ранг будет меньше ранга группы G [30].

Группу G назовем k -квазиразложимой, если G обладает определенной над k борелевской подгруппой. Это может случиться, даже, если группа G не является k -разложимой. Пусть G — k -квазиразложимая, но не k -разложимая группа простого типа. Тогда максимальный k -разложимый тор S имеет своим централизатором некоторый больший k -тор T , который максимальен в G и принадлежит некоторой борелевской k -подгруппе B .

Некоторые из корней относительно T становятся «зависимыми», если их ограничить на S , так как k -ранг меньше абсолютного ранга. Известно, что это может произойти, только если Φ обладает нетривиальным автоморфизмом графа и, следовательно, только если Φ — типа A_l, D_l, E_6 . Например, группа G типа A_3 с простыми корнями a_1, a_2, a_3 и остальными положительными корнями $a_1 + a_2, a_2 + a_3, a_1 + a_2 + a_3$. При ограничении на S корни a_1 и a_3 оказываются идентичными (обозначим их общее значение через β_1), тогда как a_2 становится характером β_2 . Оказывается, что β_1 и β_2 образуют базу для ${}_k\Phi$, а остальные положительные корни имеют вид $\beta_1 + \beta_2$ (этот корень появляется с кратностью 2) и $2\beta_1 + \beta_2$. Таким образом, ${}_k\Phi$ — типа C_2 . В этом случае группа $G(k)$ есть некоторая специальная унитарная группа. Если задано поле k и система корней типа A_l, D_l, E_6 , то существует k -квазиразложимая (но не k -разложимая) группа этого типа. Относительная система корней ${}_k\Phi$ имеет тип C_r (соответственно BC_r), если Φ — типа A_{2r-1} (соответственно A_{2r}), тип F_4 , если Φ — типа E_6 , тип B_r , если Φ — типа D_{r+1} , тип G_2 , если Φ — типа D_4 . Например, шесть простых корней E_6 приводят к четырем простым корням группы типа F_4 , как это указано на следующей диаграмме Дынкина (рис.1.14):



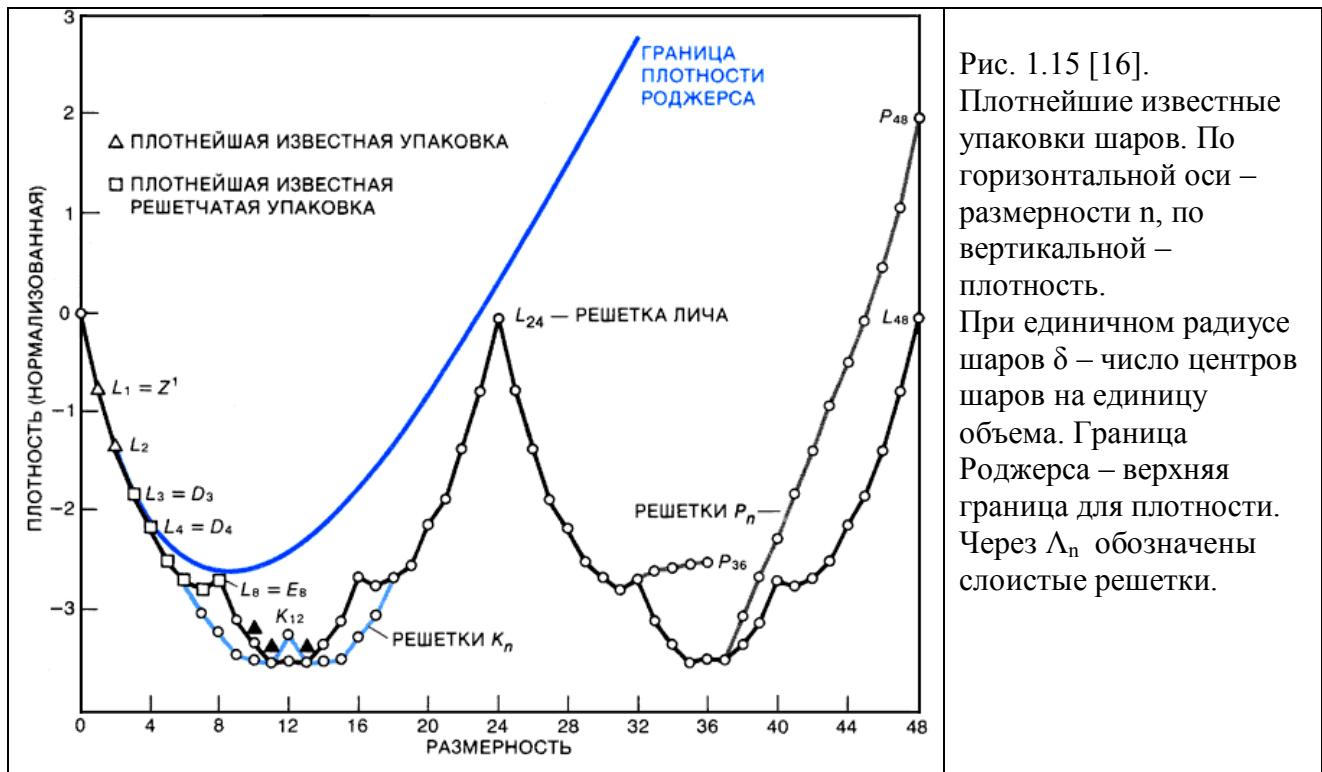
Над конечным полем k эти квазиразложимые группы дают новые семейства конечных простых групп (часто называемых «скрученными», чтобы отличить их от первоначальных групп Шевалле) [30].

1.4.1. Кристаллографическая 8 - мерная решетка E_8 .

Расслоение Хопфа для политопов

Плотнейшая упаковка сфер S^7 в E^8 соотносится с уникальной решеткой корней E_8 , - 8-мерной алмазной структуры [16], рис.1.15. Первую координационную (7-мерную) сферу решетки E_8 образуют 240 сфер S^7 , центры которых могут быть отождествлены с 240

минимальными векторами E_8 , с целыми числами Кэли, с минимальными векторами с нормой 1 в алгебре Кэли, а также (по гомоморфизму) с кольцом из 120 икосианов, которым соответствуют вершины политопа $\{3,3,5\}$ - 4-мерного икосаэдра [6,24-26]. Первую координационную сферу для глубокой дыры решетки E_8 составляют 144 вектора.



Пусть e_1, \dots, e_{n+1} – ортобазис в E^9 , тогда векторы $(e_1 - e_2, \dots, e_7 - e_8, \frac{1}{8}(3 \sum_{k=4}^8 e_k - 5 \sum_{k=1}^3 e_k) + \frac{3}{\sqrt{7}}e_9)$ в E^8 образуют кристаллографическую решетку E_8 . Первая координационная сфера E_8 состоит из множества 240 вершин полурегулярного полигона Госсета $\{4_{21}\}$, которое распадается на 10 эквивалентных подмножеств, каждое из которых принадлежит "своей" сфере S^3 и не пересекает 9 остальных.

Движение в E^4 , совмещающее две точки на S^3 , может быть представлено как вращение $\{\alpha, \beta\}$ на углы α и β в двух взаимно перпендикулярных плоскостях: X_1X_2 и X_3X_4 . Коды (1.3) определяют наличие в $\{3,3,5\}$ осей: $\{0, 2\pi/n\}$ и $\{2\pi/n, 0\}$, совпадающих в E^3 с "обычными" поворотными осями порядка $n = 2, 3, 5$; $\{2\pi/m, 2\pi/m\}$, совпадающих в E^3 с винтовыми осями m , где $m = 6, 10$; $\{2\pi/30, 2\pi \cdot 11/30\} = 30/11$, $\{2\pi/15, 2\pi \cdot 4/15\} = 15/4$ совпадающих в E^3 с нецелочисленными винтовыми осями, отображающими симметрию выпрямленного в E^3 многоугольника Петри $\{3,3,5\}$ (рис.1.6) [6, 7].

Если Y – группа вращений икосаэдра из 60 элементов $g(n, \varphi)$, где n – единичный вектор оси икосаэдра, вокруг которой происходит вращение на угол φ , то Y' – группа из 120

элементов вида $y(n, \varphi)$ и $y(n, \varphi+2\pi) = -y(n, \varphi)$, которые однозначно соответствуют $\pm\varphi$ -дисклинациям, вводимым в икосаэдр вдоль оси n . Например, элемент $y(n, -2\pi/5)$ соответствует $-2\pi/5$ -дисклинации, превращающей (при вставке клина с углом $2\pi/5$) пентагональную «шапочку» икосаэдра в гексагональную; взаимодействие дисклинаций определяется произведением соответствующих им элементов группы Y' . Введение в вершины «ромба» из двух соседних треугольных граней икосаэдра дисклинационного квадуплета (из двух $-2\pi/5$ и двух $+2\pi/5$ дисклинаций) приводит к переброске диагонали в этом «ромбе». Квадуплету или 2π -дисклинации [7] соответствует элемент $y(n, 2\pi) = -1$ группы Y' и вращение на 2π по ленте Мебиуса.

Мультиликативная группа Y' состоит из 120 элементов-икосианов:

$$\frac{1}{2}(\pm 2, 0, 0, 0)^A, \quad \frac{1}{2}(\pm 1, \pm 1, \pm 1, \pm 1)^A, \quad \frac{1}{2}(0, \pm 1, \pm \sigma, \pm \tau)^A, \quad (1.5)$$

где A означает, что разрешены все четные перестановки координат, $\sigma = \frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$, $\tau = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$. Икосиан – это кватернион $q = \alpha + \beta i + \gamma j + \delta k$, где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ принадлежат полю золотого сечения $Q(\tau) = \{a+b\sqrt{5}\}$, $a, b \in \mathbb{Z}$, \mathbb{Z} – множество целых чисел; $\bar{q} = \alpha - \beta i - \gamma j - \delta k$ и $(q \cdot \bar{q}) = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \delta^2$. Кольцо икосианов \mathfrak{I} – это множество всех конечных сумм $q_1 + \dots + q_n$, где каждый q_t – икосиан из (1.5). Если $v = (q_1, q_2, \dots)$ – вектор, элементами которого являются икосианы, то для таких векторов может быть использована кватернионная норма: $QN(v) = (v, v)$, являющаяся числом вида $a+b\sqrt{5}$; и евклидова норма $EN(v) = a+b$. По отношению к $QN(v)$ икосианы принадлежат к 4-мерному пространству над $Q(\tau)$, по отношению к $EN(v)$ они лежат в 8-мерном пространстве [16].

Если каждому икосиану (1.5) (с кватернионной нормой 1) сопоставить вектор E^4 , то мы определим 120 вершин разбиения трехмерной сферы S^3 на 600 правильных тетраэдров. Это разбиение – единственно возможное в E^n , $n \geq 3$ разбиение на правильные тетраэдры, представляет собой политоп $\{3,3,5\}$ с группой движений $(Y' \times Y')/\mathbb{Z}_2$ [7,16,22]. В евклидовой норме $EN(v)$ кольцо \mathfrak{I} изоморфно слоистой решетке Λ_8 , совпадающей с решеткой корней E_8 .

Сфера S^7 является пространством главного расслоения для структурной группы $G = SU(2)$ и пространством расслоения, ассоциированным с главным для $G = SO(4)$. Специальным (особо симметричным) примером расслоения для S^7 является кватернионное расслоение Хопфа (рис.1.16) [26]:

$$S^7 \rightarrow S^4 \text{ (слой } S^3), \quad (1.6)$$

где S^4 – база, $S^3 = SU(2)$ – слой.

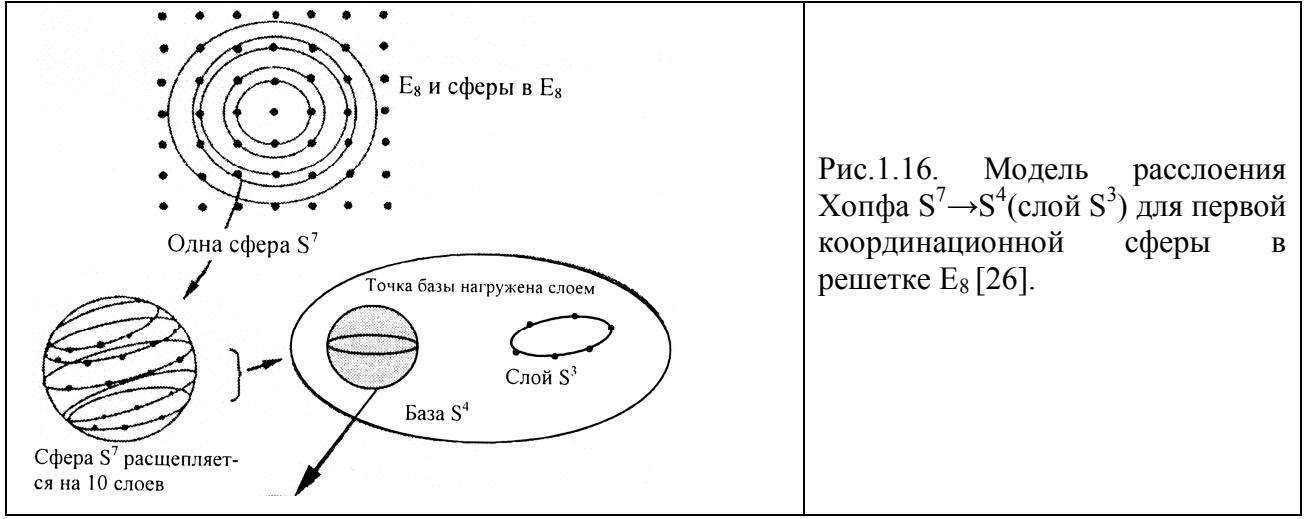


Рис.1.16. Модель расслоения Хопфа $S^7 \rightarrow S^4$ (слой S^3) для первой координационной сферы в решетке E_8 [26].

240 минимальных векторов E_8 определяют полурегулярный политоп Госсета $\{4_{21}\}$ [26] и могут рассматриваться как 10 непересекающихся множеств (по 24 вектора в каждом), которое представляет собой дискретный вариант расслоения (1.6). Базу такого расслоения образуют расположенные на S^4 10 вершин ($\infty, \pm 1, \pm i, \pm j, \pm k, 0$) 5-мерного октаэдра $\{3,3,3,4\}$, а 24 вектора слоя определяют 4-мерный политоп $\{3,4,3\}$. Структурной группой, отображающей слой на себя, является группа Гурвица Н единичных целых кватернионов, 8 и 16 элементов которой $\{\pm 1, \pm i, \pm j, \pm k\}$ и $\{\frac{1}{2}(\pm 1, \pm i, \pm j, \pm k)\}$ определяют вершины дуальных политопов $\{3,3,4\}$ и $\{4,3,3\}$:

$$\{3,4,3\} = \{3,3,4\} \cup \{4,3,3\}. \quad (1.7)$$

Политоп $\{3,4,3\}$ также можно рассматривать, как дискретный вариант расслоения Хопфа

$$S^3 \rightarrow S^2 \text{ (слой } S^1\text{)}, \quad (1.8)$$

в котором базу образуют вершины $\{0, \pm 1, \pm i, \infty\}$ октаэдра $\{3,4\}$, а слой $\{4\}$ содержит 4 точки: $\{\pm 1, \pm i\}$. Множество точек, взятых по одной из каждого слоя, называются глобальным сечением расслоения, если каждую пару ближайших точек образуют точки из двух соседних слоев. Глобальное сечение существует не для всякого расслоения; например, для расслоения $\{3,4,3\} \rightarrow \{3,4\}$ (слой $\{4\}$) существуют лишь локальные расслоения, содержащие 5 точек из 5 слоев. При этом два "соседних" локальных сечения имеют по 4 точки из одних и тех же слоев [25]. Каждая из 6 вершин $\{0, \infty, \pm 1, \pm i\}$ базы – октаэдра, нагружена 4 точками слоя, лежащими на одной окружности. Каждая определяется кватернионом, который задается парой комплексных чисел: $(\pm 1, 0), (0, \pm 1), (\pm i, 0), (0, \pm i)$, $1/2(\pm 1 \pm i, \pm 1 \pm i)$ и соответствующей ему вершиной базы. Связность расслоения определяется правилом, которое ставит в соответствие соседним вершинам в базе соседние вершины в пространстве расслоения. Для

каждой точки слоя в расслоении существуют 8 соседних точек. Например, для точки $(1,0)_{\infty}$ ближайшими будут по 2 точки из слоев $1, -1, i, -i$, но не существует ближайших к ним точек в слоях ∞ и 0. В частности, для точки $(1, 0)_{\infty}$ ближайшими являются точки $1/2(1+i, 1+i)_1$ и $1/2(1-i, 1-i)_1$.

Дискретный вариант расслоения (1.8) возможен и для политопа $\{3,3,5\}$, 120 вершин которого определяют разбиение S^3 на 600 тетраэдров:

$$\{3,3,5\} = \{p,q\}(\text{слой } \{p'\}) \quad (1.9)$$

где база $\{p,q\}$ – икосаэдр, додекаэдр или икосидодекаэдр, число вершин 12, 20, или 30 которого, соответственно, совпадает с инвариантом некристаллографической системы корней H_4 [28], а слой содержит 10 (рис. 1.17), 6 или 4 вершины.

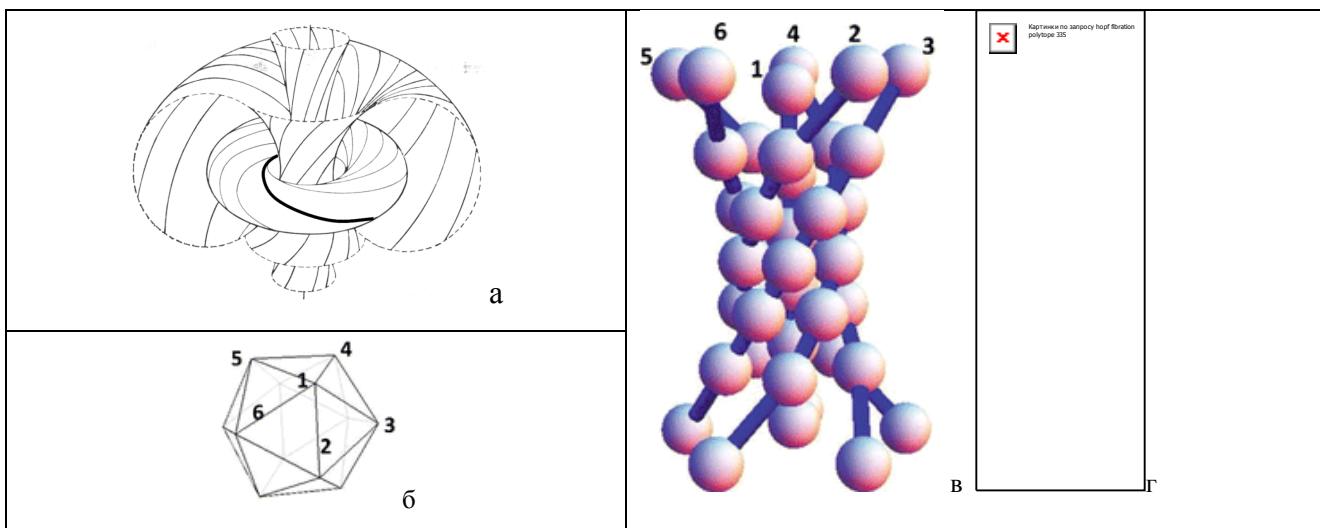


Рис.1.17. **а** - Стереографическая проекция S^3 на E^3 как семейство торов в E^3 , которые "склеены" по своим окружностям Вилларсо, одна из которых выделена жирной линией. Множество всех окружностей Вилларсо реализует разбиение Хопфа для S^3 [143].
б – Икосаэдр- база расслоение Хопфа для политопа $\{3,3,5\}$.
в, г – Выпрямление в E^3 6 и 3 слоев расслоения, каждый из которых соответствует одной вершине базы. В каждом слое показана лишь часть из его 10 вершин [143].

Соединение ребрами ближайших вершин трех ближайших друг к другу слоев (рис. 1.17г) в расслоении (1.9) приводит к определению в E^3 линейной цепи, образованной одинаковыми правильными тетраэдрами, объединенными по торцевым граням. Выпрямленная “конформация” такой цепи представлена на рис. 1.18а; вариант такой бесконечной цепи известен как спираль Бердийка-Коксетера или тетраспираль. В политопе $\{3,3,5\}$ каждая тетраспираль состоит из 30 тетраэдров, имеет 30 вершин и замкнута в тор. Взаимное расположение друг относительно друга этих спиралей приведено на рис. 1.18б.

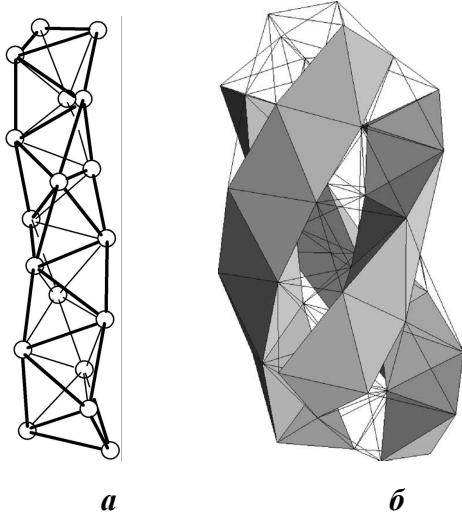


Рис.1.18. а- Спираль Бердийка-Коксетера или тетраспираль.

б- Выпрямление тетраспиралей из политопа $\{3,3,5\}$ в E^3 [174].

Рассмотренные выше дискретные расслоения Хопфа для E_8 и $\{3,4,3\}$ можно объединить в общей схеме:

$$\begin{array}{ccccccc}
 E^8 & \supset & S^7 & \rightarrow & S^4 & \quad E_8 & \supset \{4_{21}\} \\
 & & \downarrow & & & & \downarrow \\
 & & S^3 & \rightarrow & S^2 & \quad \{3,4,3\} & \rightarrow \{3,4\} \\
 & & \downarrow & & & & \downarrow \\
 & & S^1 & & & \{4\} &
 \end{array} \tag{1.10}$$

где символ слоя расположен под стрелкой, идущей вниз от стрелки, проведенной от пространства расслоения к базе.

Если P - точка $\frac{1}{\sqrt{5}} (1,1,1,1,1)$ базы S^4 , находящаяся на равном расстоянии от 5 из 10 точек базы и определяющая 4-мерную гиперплоскость E^4 , то отображение $\{4_{21}\}$ на E^4 означает отображение на нее 10 политопов $\{3,4,3\}$, которые по 5 попадают на сферы S^3 , (радиуса 1 и τ), образуя два концентрических политопа $\{3,3,5\}$, рис.1.19:

$$\{4_{21}\} \leftrightarrow \{3,3,5\} \cup \tau \{3,3,5\} \tag{1.11}$$

При этом взаимное расположение вершин А, В, С, Д (рис.1.19) относительно друг друга определяется соотношениями, показанными на рис.1.20.

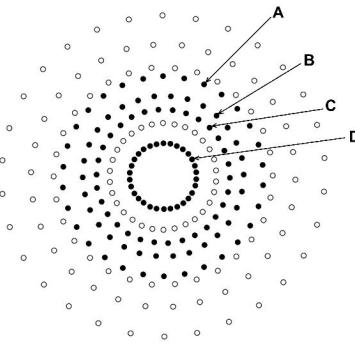


Рис.1.19

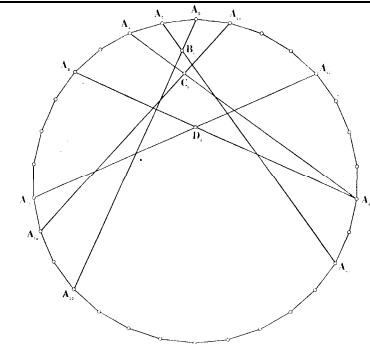


Рис.1.20

Рис.1.19. Проекция 240 вершин E_8 в 8 концентрических 30-вершинных триаконтаэдр [24]. Вершины E_8 разбиваются на 120 вершин (черные кружки), соответствующих политопу $\{3,3,5\}$ единичного радиуса, и 120 вершин (пустые кружки), соответствующих концентрическому с ним политопу $\{3,3,5\}$ радиуса τ .

Рис.1.20. Расположение вершин A,B,C,D относительно друг друга [24].

Множество всех 120 вершин политопа $\{3,3,5\}$ разбивается на 4 подмножества A, B, C, D по 30 вершин в каждом:

$$\begin{aligned}
 A_m &= \left[a \exp\left(i\pi m \frac{1}{30}\right), d \exp\left(i\pi m \frac{11}{30}\right) \right], \quad m(\text{even}) = 0, 2, \dots, 58 \\
 B_m &= \left[b \exp\left(i\pi m \frac{1}{30}\right), c \exp\left(i\pi m \frac{11}{30}\right) \right], \quad m(\text{odd}) = 1, 3, \dots, 59 \\
 C_m &= \left[c \exp\left(i\pi m \frac{1}{30}\right), -b \exp\left(i\pi m \frac{11}{30}\right) \right], \quad m(\text{odd}) = 1, 3, \dots, 59 \\
 D_m &= \left[d \exp\left(i\pi m \frac{1}{30}\right), -a \exp\left(i\pi m \frac{11}{30}\right) \right], \quad m(\text{even}) = 0, 2, \dots, 58,
 \end{aligned} \tag{1.12}$$

$$a = \left[\frac{1}{2}(1+s) \right]^{1/2}, \quad b = \left[\frac{1}{2}(1+s\tau^{-2}) \right]^{1/2}, \quad c = \left[\frac{1}{2}(1-s\tau^{-2}) \right]^{1/2}, \quad d = \left[\frac{1}{2}(1-s) \right]^{1/2},$$

где $s = 3^{-1/2}5^{-1/4}\tau^{3/2}$

Проекции на плоскость 48 векторов 4-мерной системы корней F_4 и 240 векторов решетки E_8 представлены в [144].

1.4.2. Некристаллографическая 4-мерная система векторов H_4

Согласно [27], рассмотрим графы групп A_4 , D_6 , E_8 в форме, представленной в последнем столбце рис.1.11. Возьмем произведения образующих этих групп, расположенных в одном столбце:

$$\beta_1 = \alpha_1 \alpha_2, \quad \beta_2 = \alpha_3 \alpha_4, \quad \beta_3 = \alpha_5 \alpha_6, \quad \beta_4 = \alpha_7 \alpha_8, \tag{1.13}$$

образующие в одном столбце не соединены ребром, а потому коммутируют и $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ определены независимо от порядка сомножителей.

Теорема 2. Подгруппы в группах Кокстера A_4 , D_6 , E_8 , образующими которых являются элементы $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ (1.13), изоморфны группам Кокстера H_2 , H_3 , H_4 , соответственно.

Теорема 3. Ограничения стандартных представлений групп A_4 , D_6 , E_8 на определенные выше подгруппы в них раскладываются в суммы двух неэквивалентных, каждое из которых действует как группа отражений H_2 , H_3 , H_4 соответственно.

Фиксируя разные камеры групп A_4 , D_6 , E_8 , ассоциированные с их графами Кокстера, мы будем, вообще говоря, получать разные подгруппы H_2 , H_3 , H_4 (естественно, сопряженные). Однако две разные камеры могут определять одну и ту же подгруппу, но понятия «стандартного» и «нестандартного» представлений последней будут меняться местами. Иными словами, внешние автоморфизмы подгрупп H_2 , H_3 и H_4 , превращающие «стандартное» представление в «нестандартное» и обратно, реализуются внутренними автоморфизмами групп A_4 , D_6 , E_8 . Поскольку в группе отражений, как правило, не выделена внешними условиями никакая «превалирующая» камера, это замечание представляется нам весьма существенным. По одной и той же камере в пространстве представления группы D_6 подгруппу H_3 можно определить двояко, поскольку камера группы D_6 обладает нетривиальной симметрией (определяющей внешний автоморфизм группы D_6). Набором образующих для второй подгруппы является $\beta_1 = \alpha_5\alpha_2$, $\beta_2 = \alpha_3\alpha_4$, $\beta_3 = \alpha_1\alpha_6$. В соответствии с этим есть два типа трехмерных плоскостей в E^6 , на которых действует группа H_3 .

Диаграммы Коксетера –Дынкина для системы H_4 и ее подсистем приведены в табл. 1.2.

Таблица 1.2. Диаграммы Коксетера –Дынкина для системы H_4 и ее подсистем, порожденных отражениями [27].

H_4	
H_3	
A_3	
$I_2(5) \times A_1$	
$A_2 \times A_1$	
$I_2(5)$	
A_2	
A_1^2	
A_1	

1.5. Блоковый дизайн, система Штейнера, коды.

По определению, $t-(v,k,\lambda)$ -схема блокового дизайна – это множество из v элементов, разбитое на b подмножеств (блоков) из k элементов так, что любые t элементов содержатся в λ блоках. При $t = 1$ имеем $bk = vr$, так что каждый элемент принадлежит r блокам [16]. Таблица инцидентности (ТИ) конечной проективной плоскости $PG(2,q)$ представляет собой частный случай ($t = 2, \lambda = 1$) схемы $t-(v,k,\lambda)$, определяемой следующими соотношениями: в каждой строке длины v таблицы $t-(v,k,\lambda)$ имеется ровно k знаков инцидентности; для любых t столбцов существует ровно λ строк, пересекающих каждый из этих столбцов по квадратам, содержащим знак инцидентности; все столбцы содержат одно и то же число знаков инцидентности. Если знак инцидентности считать 1, а отсутствие знака – 0, то при $\lambda = 1$ блок–схема $t-(v,k,\lambda)$ совпадает с системой Штейнера $S(t,k,v)$ двоичного кода, т.е. замкнутым подмножеством его слов длины и веса k (состоящих из k единиц и $v-k$ нулей). Так, например, ТИ конечной проективной геометрии $PG(2,2)$ – это блок–схема $2-(7,3,1)$ или система Штейнера $S(2,3,7)$. Действительно, для любых двух столбцов ТИ $PG(2,q)$ всегда найдется одна строка, которая пересекает их по знакам инцидентности (т.к., согласно аксиоме 1 проективной геометрии, для любых двух различных точек существует единственная инцидентная им прямая). $S(2,3,7)$ – это 7 слов веса 3 в коде Хэмминга H_7 .

Примером $2-(11, 5, 2)$ –схемы является биплоскость, которую образуют блоки $B_1 = 13459, B_2 = 2456X, B_3 = 35670, B_4 = 46781, B_5 = 57892, B_6 = 689X3, B_7 = 79X04, B_8 = 8X015, B_9 = 90126, B_X = X1237, B_0 = 02348$. Действительно, $v = 11$ – это 11 чисел от 0 до 10, причем 10 обозначено X ; блок состоит из $k = 5$ чисел. Какие бы 2 числа мы ни взяли, найдутся только два блока из $b = 11$, которые их содержат [145]. Например, 5 и 7 содержатся только в 3-м и 5-м блоках и т.д.

Геометрическая иллюстрация $2-(11,5,2)$ –схемы (биплоскость) изображена на рис.1.21. Внешний пентагон на рис.1.21 соединяет 5 вершин 1, 3, 9, 4 и 5. Они образуют блок B_1 , который отображается на себя поворотом на $1/5$ вокруг 0. Пунктир соединяет точки 4, 8, 0, 2, 3, образующие блок $B_0 = 02348$, который при данном повороте отображается в блок $B_9 = \{1, 2, 0, 6, 9\}$. В свою очередь, B_9 отображается в $B_3 = \{3, 6, 0, 7, 5\}, B_3$ в $B_7 = \{9, 7, 0, X, 4\}, B_7$ в $B_8 = \{5, X, 0, 8, 1\}$, и B_8 в B_0 . Жирная линия соединяет точки 2, 9, 7, 5, 8, образующие блок $B_5 = \{5, 7, 8, 9, 2\}$. При рассматриваемом вращении B_5 отображается в $B_2 = \{6, 5, X, 4, 2\}, B_2$ в $B_4 = \{7, 4, 8, 1, 6\}, B_4$ в $B_X = \{X, 1, 2, 3, 7\}, B_X$ в $B_6 = \{8, 3, 6, 9, X\}$, и B_6 в B_5 . Таким образом, поворот на $1/5$ вокруг 0 определяет перестановку пятого порядка $(B_2 B_4 B_X B_6 B_5)(B_0 B_9 B_3 B_7 B_8)(B_1)$ блоков

биплоскости. Перестановкой 2-го порядка является $(B_2\ B_6)(B_4\ B_X)(B_3\ B_7)(B_8\ B_9)(B_0)(B_1)(B_7)$, а перестановку 3-го порядка определяет перестановка вершин $\alpha=(459)(27\ X)(068)$.

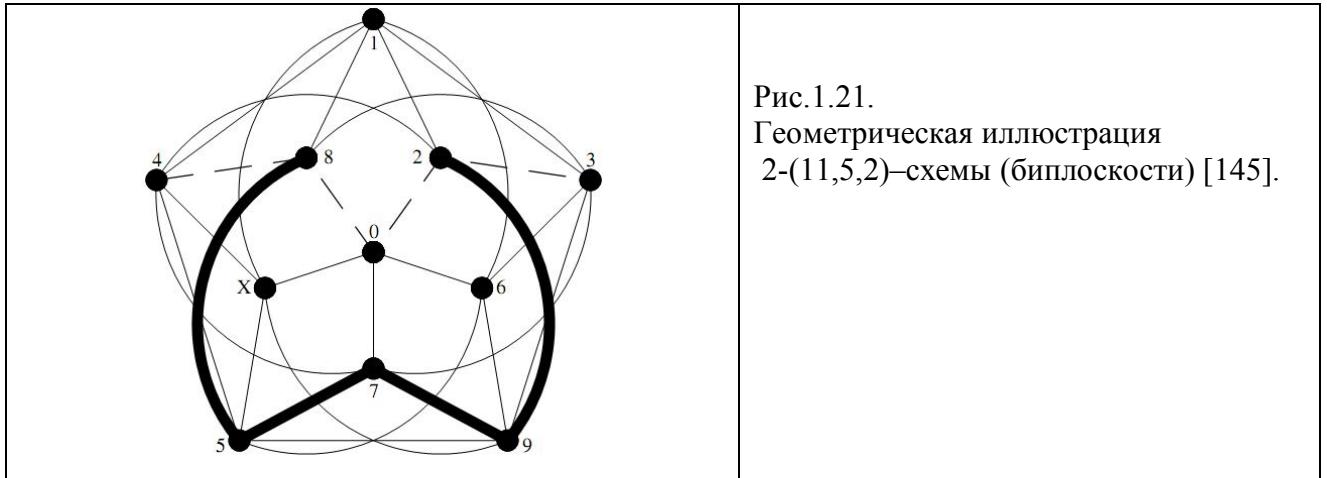


Рис.1.21.
Геометрическая иллюстрация
2-(11,5,2)-схемы (биплоскости) [145].

Пусть $B_1=\{1, 3, 4, 5, 9\}$, стартовый блок $2-(11, 5, 2)$, $B=B_1 \cup \{\infty\}$ и множество $\{0, 1, \dots, 10\}$ обозначим через $[0 .. 10]$. Примем, что $\infty \pm x = \infty$ для всех x , и $Y + m := \{y + m | y \in Y\}$. Например,

$$B + 6 = \{1 + 6, 3 + 6, 4 + 6, 5 + 6, 9 + 6, \infty + 6\} = \{7, 9, 10, 0, 4, \infty\}.$$

Обозначим через σ и s перестановки множества $[0 .. 10]$ и $[0 .. 10] \cup \{\infty\}$,

$$\sigma = (1-10)(25)(37)(48)(69) \text{ и } s = (0 \ \infty) \sigma.$$

Тогда, если например, $B + 6 = \{7, 9, 10, 0, 4, \infty\}$, то $s(B + 6) = s(\{7, 9, 10, 0, 4, \infty\}) = \{s(7), s(9), s(10), s(0), s(4), s(\infty)\} = \{3, 6, 1, \infty, 8, 0\}$. Соответственно, $s(B + 6) + 3 = \{6, 9, 4, \infty, 0, 3\}$. С учетом вышеизложенного, для систем Штейнера имеем:

$$S(5, 6, 12) = \{B + k | k \in [0 .. 10]\} \cup \{s(B + k) + j | j, k \in [0 .. 10]\};$$

$$S(4, 5, 11) = \{B_1 + k | k \in [0 .. 10]\} \cup \{\sigma(B_1 - n) + k | n \in B_1, k \in [0 .. 10]\}; \quad (1.14)$$

$S(3, 4, 10) = S(4, 5, 11)$, в которой отбрасываются блоки, содержащие 10.

$S(2, 3, 9) = S(3, 4, 10)$ в которой отбрасываются блоки, содержащие 0 [145].

Системой Штейнера $S(t, k, v)$ называется $t-(v, k, 1)$ -схема; система $S(4, 5, 11)$, состоящая из 66 блоков, приведена в [145]. Каждое число входит в $bk/v=r=30$ блоков. Система $S(4, 5, 11)$ однозначно определяет систему $S(5, 6, 12)$, группой автоморфизмов которой является группа Матье M_{12} [145].

Конечная проективная плоскость $PG(2, q)$ является системой Штейнера $S(t, k, v) = S(2, q+1, q^2+q+1)$. Действительно, для $PG(2, q)$ число точек v (столбцов в таблице инцидентности) и прямых b (блоков, то есть строк в ТИ) равно $v = b = q^2+q+1$; число k точек на прямой (число точек в блоке)

и число r прямых, проходящих через одну точку (каждая точка принадлежит r прямым) равно $k = r = q+1$. Любые две точки ($t = 2$) принадлежат одной ($\lambda=1$) прямой, а общее число знаков инцидентности в ТИ $PG(2,q)$ равно $b \cdot k = v \cdot r = (q^2+q+1)(q+1)$ [21].

Для любого целого t (где $2 \leq t' \leq t$) каждая t -схема определяет и t' -схему, для которой $t'=t-1$, $\lambda'=\lambda(v+1-t)/k+1-t$. Это позволяет по известной $PG(2,q)$ строить более общие $t-(v,k,\lambda)$ схемы [21]. Если существует система Штейнера $S(p,q,r)$, то для $0 \leq j \leq p - 1$ существует и система Штейнера $S(p - j, q - j, r - j)$. Данное соотношение определяет, в частности, пары систем $\{S(4, 5, 11), S(5, 6, 12)\}$ и $\{S(4, 7, 23), S(5, 8, 24)\}$.

Каждый блок B в $t-(v,k,\lambda)$ -схеме может быть представлен своим характеристическим вектором (c_1, \dots, c_v) , таким, что $c_i = 1$, если $i \in B$, и $c_i = 0$ если $i \notin B$. Таким образом, t -схема является и двоичным кодом, в каждом слове которого из v символов находятся k ненулевых. Группа $PSL_2(11)$, представляет собой группу автоморфизмов биплоскости [145], что определяет трактовку группы M_{12} и как группы автоморфизмов троичного кода Голея G_{12} . Этот код определяется добавлением проверки на четность к коду G_{11} , состоящему из 729 наборов (слов), в которых по 11 позициям размещены 1, -1 и 0. Код Голея G_{11} – это вариант, когда учитывается порядок чисел в системе Штейнера. Слово кода – это набор $(011\dots-10)$. Всего 11 символов, место в слове – число от 0 до 10.

$$\begin{aligned} G_{11} &= 1 + 132x^5 + 132x^6 + 330x^8 + 110x^9 + 24x^{11} \\ G_{12} &= 1 + 264x^6 + 440x^9 + 24x^{12} \end{aligned} \quad (1.15)$$

где Ax^n обозначает число A наборов x^n , состоящих из n ненулевых символов [16]. Если 0 сопоставляется пустая клетка в ТИ, 1 – это знак инцидентности, то -1 сопоставляется пустая клетка ТИ, в которую может быть перенесен знак инцидентности. Если знак инцидентности считать 1, а отсутствие знака – 0, то при $\lambda = 1$ блок–схема $t-(v,k,\lambda)$ совпадает с системой Штейнера $S(t,k,v)$ двоичного кода, т.е. замкнутым подмножествам его слов длины v и веса k (состоящих из k единиц и k нулей). Так, например, таблица $PG(2,2)$ – это блок–схема $2-(7,3,1)$ или система Штейнера $S(2,3,7)$. Действительно, какие бы два столбца $\Gamma(q)$ мы ни взяли, всегда найдется одна строка, которая пересекает их по знакам инцидентности (т.к., согласно аксиоме 1 проективной геометрии для любых двух различных точек существует единственная инцидентная им прямая). $S(2,3,7)$ – это 7 слов веса 3 в коде Хэмминга H_7 , который включает еще 7 слов веса 4 и по одному слову веса 0 и 7. Сокращенно это записывается в виде: $0^1 3^7 4^7 7^1$ и означает, что $H_7 = \{(0000000), (1101000) \dots (1011100) \dots (1111111)\}$ [16].

В двоичном коде Голея ε_{24} 759 слов, которые всегда образуют систему Штейнера $S(5,8,24)$. Эти 759 слов (в каждом из которых 8 единиц и 16 нулей) называются октадами.

Слово кода ε_{24} определяет соответствующее ему ε -множество, т.е. набор мест 6x4-таблицы, в которой стоят ненулевые символы. ε -множества образуют дополнительные пары, т.е. каждое слово веса 8 из ε_{24} дополняется словом веса 16 – дополнением октады.

Гранецентрированная кубическая решетка D_3 – плотнейшая решетчатая упаковка шаров в E^3 , определяется двоичным линейным кодом $C = \{000, 011, 101, 110\}$, состоящим из 3-х слов длины $n=3$, которые содержат по $d=2$ единицы, и нулевого слова. Для кода C число слов $A_d(0)$, отличающихся от нулевого слова не менее чем в d координатах, равно 3. В общем случае, если $d < 4$, ближайшими к началу координат центрами являются $2^d A_d(0)$ векторов вида $\frac{1}{\sqrt{2}} (\pm l)^d 0^{n-d}$,

полученных из кодовых слов веса d . Для таких центров квадрат расстояния от начала координат составляет $d/2$. Если $d > 4$, то ближайшими к началу координат являются 2^d центров типа $(\pm \sqrt{2})^l 0^{n-l}$, квадрат расстояния от которых до начала координат равен 2. Наконец, если $d = 4$, оба множества центров находятся на одинаковом расстоянии от начала координат. Поэтому число шаров, касающихся шара с центром в нуле, равно

$$\tau = \begin{cases} 2^d A_d(0), & \text{если } d < 4, \\ 2n + 16A_d(0), & \text{если } d = 4 \\ 2n, & \text{если } d > 4 \end{cases} \quad (1.16)$$

[7, 4, 3] – это код Хэмминга H_7 , представляющий собой двоичный код длины 7, с весовым спектром $A_0 = 1, A_3 = A_4 = 7, A_7 = 1$. Группа автоморфизмов $\text{Aut}(H_7)$ – это группа Клейна порядка $168 = 4 \cdot 6 \cdot 7$. Расширенный [8, 4, 4]-код Хэмминга H_8 получается добавлением к H_7 проверки на четность. Весовой спектр кода H_8 равен $0^{14} 1^1 8^1$, а группа автоморфизмов $\text{Aut}(H_8)$ – аффинная группа порядка $8 \cdot 7 \cdot 6 \cdot 4 = 1344$. Используя конструкцию A , сопоставляющую код упаковке, к H_7 , получим $E_7 \cong \Lambda_7$ – плотнейшую решетчатую упаковку в E^7 с $\tau = 2 \cdot 7 + 16 \cdot 7 = 126$. Применяя конструкцию A к H_8 , получим $E_8 \cong \Lambda_8$ – плотнейшую решетчатую упаковку в E^8 с $\tau = 2 \cdot 8 + 16 \cdot 14 = 240$. Таким образом, решетка E_8 образуется применением конструкции A к коду Хэмминга H_8 ; минимальные векторы (после перенормировки) суть $2^4 \cdot 14 = 224$ вектора вида $((\pm 1/2)^4, 0^4)$ и 16 векторов вида $(\pm 1, 0^7)$ [16].

1.5.1. Конечные проективные плоскости и конфигурации

Проективная плоскость $PG(2,K)$ состоит из евклидовой плоскости $E^2 = EG(2,K)$, к которой добавлено по одной "точке на бесконечности" для каждого пучка параллельных в E^2 прямых. Модель $PG(2,K)$ представлена на рис.1.22. Прямая общего положения в E^3 , проходящая через 0, не содержится в плоскости ($Z = 0$), и, значит, пересекает плоскость $Z = 1$ в единственной точке. Прямые, лежащие в плоскости ($Z = 0$), не пересекают плоскость $Z = 1$, следовательно, они соответствуют не точкам из E^2 , а пучкам параллельных прямых в E^2 .

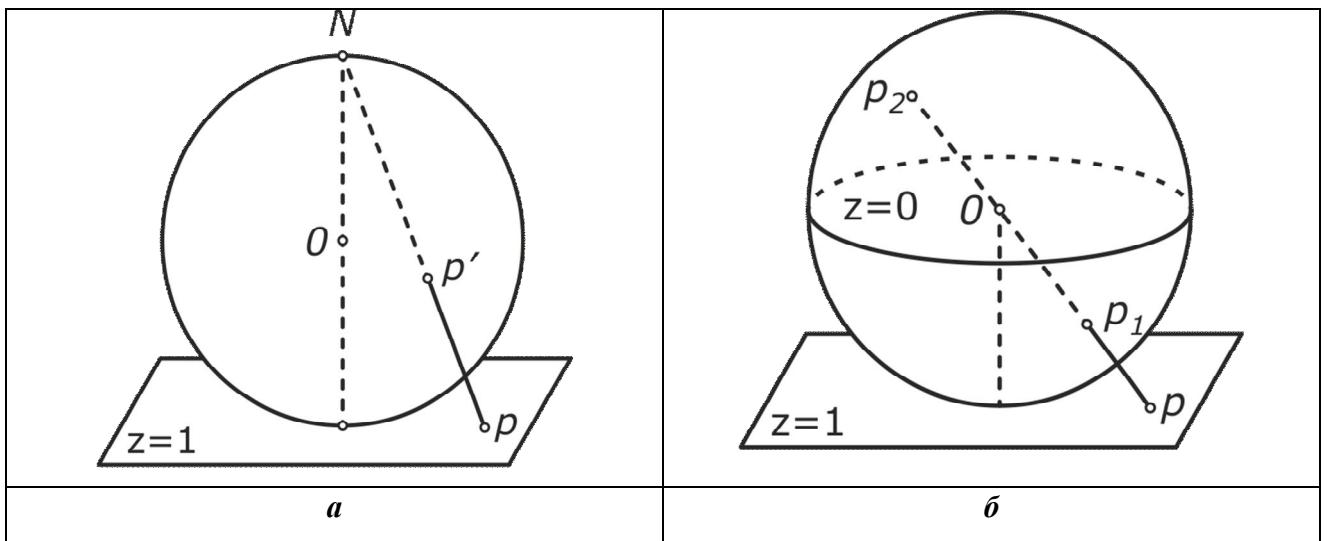


Рис.1.22. Евклидова и проективная плоскости [23].

(*а*) - сфера S^2 однозначно проектируется в плоскость E^2 при проектировании из северного полюса N.

(*б*) - пара диаметрально противоположных точек S^2 проектируется в одну точку проективной плоскости $PG(2,k)$. При проектировании из центра сферы экватор проектируется в бесконечно удаленную прямую, не принадлежащую E^2 .

Структура, содержащая n точек P_1, P_2, \dots, P_n и n прямых l_1, l_2, \dots, l_n , $n = q^2+q+1$, в которой через каждую точку проходит $q+1$ "прямая", состоящая из $q+1$ точки, называется конечной проективной плоскостью $PG(2,q)$ порядка q . Плоскость $PG(2,q)$ однозначно определяется своей таблицей инцидентности (принадлежности) представляющей собой квадратную таблицу $n \times n$, в которой столбцы P_1, P_2, \dots, P_n называются "точками", а строки l_1, l_2, \dots, l_n – "пряммыми". Инцидентность точки P_i и прямой l_j определяется заполнением клетки i,j (кружком) в этой таблице, пустая клетка означает отсутствие инцидентности. На рис.1.23 приведен пример разбиения таблицы инцидентности (ТИ(3)) плоскости $PG(2,3)$ на заполненные определенным образом Г-образные «крюки». ТИ(q), устроенная подобным образом, называется Г-таблицей и обозначается через $\Gamma(q)$; любая ТИ(q) может быть переведена в $\Gamma(q)$ перестановками строк и столбцов. Значение изоморфизма $TI(q) \leftrightarrow \Gamma(q)$

определяется тем, что $\Gamma(q)$ может быть построена по таблицам сложения и умножения поля $GF(q)$ – поля Галуа порядка q [21].

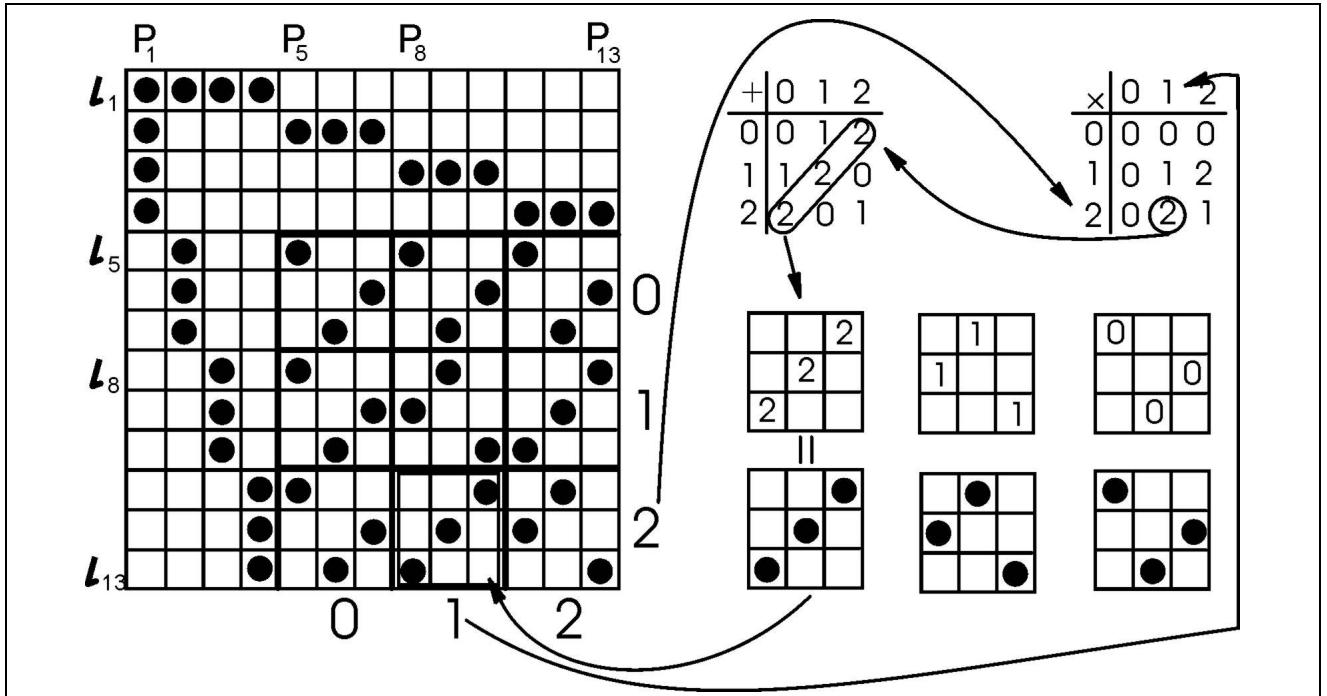


Рис.1.23. Построение таблицы инцидентности конечной проективной плоскости $PG(2,3)$ по таблицам сложения и умножения поля Галуа $GF(3)$ [21]. Индексы 2 и 1 показанного двойными линиями квадрата C^{21} совпадают с элементами 2 и 1 строки и столбца таблицы умножения (х) поля Галуа $GF(3) = \{0,1,2\}$. Произведение этих элементов определяет элемент 2, распределение которого в таблице сложения (+) $GF(3)$ и является распределением знаков инцидентности в квадрате C^{21} . Квадраты C^{mx} с m или x , равными 0, одинаковы и представляют собой распределение 0 в таблице сложения $GF(3)$. Квадрат из 3^2 квадратов C^{mx} , $m,x = 0,1,2$ представляет собой Q – внутренность таблицы. Первые 4 строки и столбца образуют Г–крюк.

В каждой строке и каждом столбце таблицы $\Gamma(q)$ содержится по $q+1$ кружку; q^2 строк и столбцов $l_{q+2}, l_{q+3}, \dots, l_n$ и $P_{q+2}, P_{q+3}, \dots, P_n$ образует Θ – внутренность таблицы $\Gamma(q)$, которая может быть представлена как квадратная таблица из $q \times q$ квадратов C^{mx} , каждый из которых состоит в свою очередь из $q \times q$ клеток. Расположение знаков в "крюках" $P_1 - l_1$ и $P_2, \dots, P_{q+1} - l_2 \dots l_{q+1}$ – ступенчатое, распределение знаков во всех qxq квадратах Θ – является одним из $q!$ различных диагональных распределений, при котором в каждой строке и каждом столбце встречается ровно один знак. Если первые или вторые индексы двух квадратов C^{mx} совпадают и не равны нулю, то распределение знаков в этих квадратах различно. Каждый из q^2 квадратов C^{mx} характеризуется своим индексом mx , а каждый знак инцидентности в этом квадрате – индексом by ; $m,x,b,y=0,1, \dots, q-1=Q$. Квадрат C^{mx} соответствует клетке таблицы умножения поля Галуа $GF(q)$, определяемой строкой m и столбцами x ; пусть в этой клетке

стоит число $mx=t$. То же число t будет находиться в клетке таблицы сложения поля $FG(q)$: $b+y=t$ (рис.1.23).

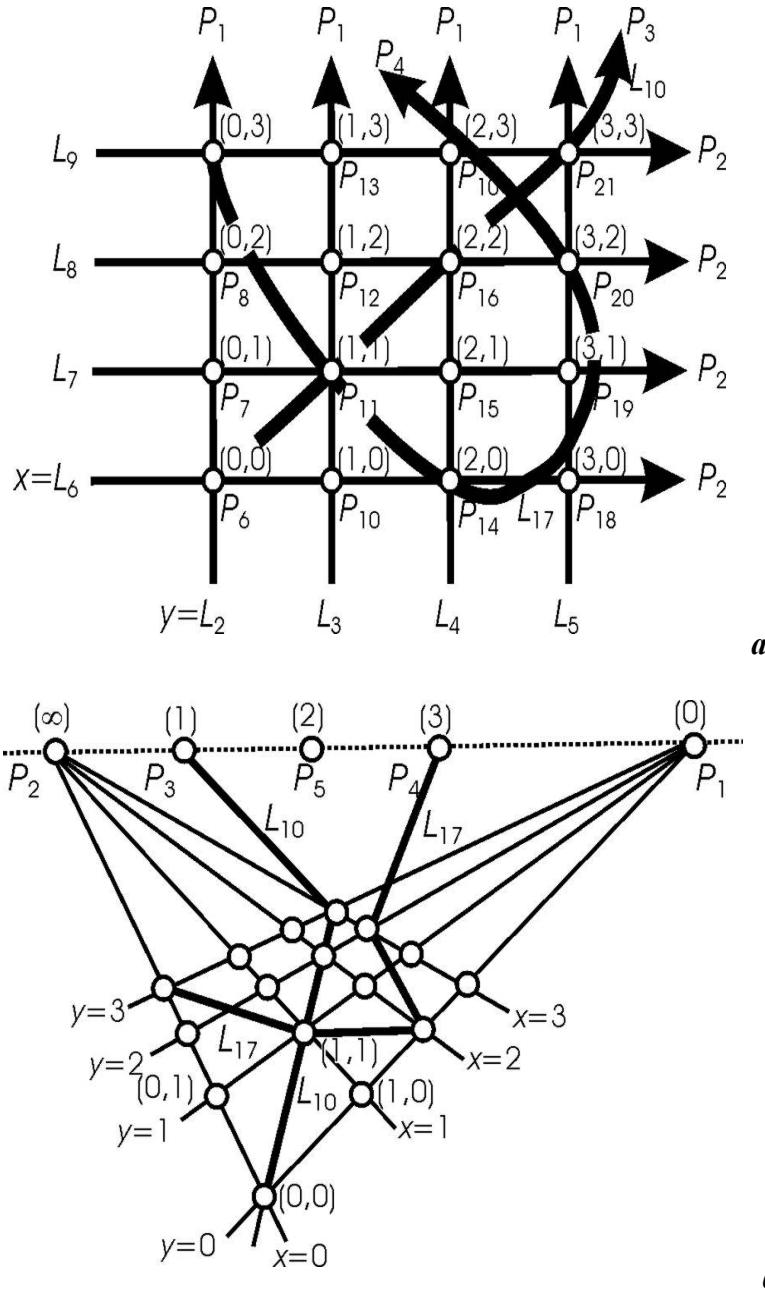


Рис.1.24. Графические модели конечной проективной плоскости $PG(2,4)$ [21].

а - $PG(2,4)$ как расширение конечной евклидовой плоскости $EG(2,4)$, состоящей из 42 (неидеальных) точек $(0,0), (0,1) \dots (3,3)$, определяемых пересечением прямых $l_2, \dots l_{4+1}$ и $l_{4+2}, \dots l_{2x4+1}$. Идеальные точки $P_1, \dots P_5$ образуют (не показанную на рис.) бесконечно удаленную (идеальную) прямую l_1 ; остальные диагональные «прямые» (например, l_{10}, l_{17}) не изображаются в виде прямых $EG(2,4)$.

б - Модель $PG(2,4)$, на которой представлена (пунктиром) идеальная прямая. Диагональные прямые l_{10} и l_{17} заканчиваются в идеальных точках 1 и 3 и изображаются ломаными из 4-х звеньев.

Таким образом, в квадрате C^{mx} клетка со строчным и столбцевым индексом by будет содержать знак инцидентности лишь при $mx = t = b+y$, т.е. когда $y = mx - b$. Эту клетку t можно рассматривать и как пересечение “строки” $[m,b]$ со “столбцом” (x,y) , поэтому можно говорить о прямой $[m,b]$ и о точке (x,y) , и сопоставить $PG(2,q)$ с евклидовой плоскостью (рис.1.24).

Если прямой на евклидовой плоскости $EG(2,k)$ приписать пару координат $[m,b]$, а точке – (x,y) , то инцидентность прямой (строки) и точки (столбца) эквивалентна равенству $y = mx - b$, которое можно рассматривать как тернарную операцию $y=F(x,m,b)$ на множестве действительных чисел. Таблица $\Gamma(q)$ задает тернарную операцию $y=F(x,m,b)$ на $GF(q)$, поэтому наряду с аналогичными для $EG(2,q)$ соотношениями возникают и соотношения, свойственные лишь $PG(2,q)$:

- 1). Роль идеальных точек играют точки P_1, P_2, \dots, P_{q+1} , которым приписываются обозначения $0, 1, \dots, q-1$ и (∞) . Множество точек $(0), (1), \dots, (q-1)$ и (∞) образуют идеальную прямую l_1 . Обыкновенные точки $P_{q+2} \dots P_n$ – это пары (x,y) элементов из Q . P_{q+2} и P_{2q+3} играют роль начала координат $(0,0)$ и точки $(1,1)$, соответственно.
- 2). q прямых первого и q прямых второго семейства – это множества $\{(0), (x,y)|x,y \in Q, y=\text{const}\}$ и $\{(\infty), (x,y)|x,y \in Q, x=\text{const}\}$.
- 3). Клетки, содержащие любой элемент $j \in Q$, распределены в любом латинском квадрате $f \in Q^* = \{1, \dots, q-1\}$ диагональным образом. Поэтому $q(q-1)$ диагональных прямых – это множество, состоящее из идеальной точки (f) и обыкновенных точек (x,y) , которые определяют клетки со значением j в латинском квадрате f . Таким образом, каждая прямая $[j,f]$ является ломаной, состоящей из q звеньев и заканчивающейся идеальной точкой данной прямой [21].

Итак, $PG(2,q)$ содержит $q+1$ идеальную и q^2 обычных точек; одну идеальную прямую, $2q$ прямых первого и второго семейства и $q(q-1)$ диагональных прямых (рис.1.24, 1.25).

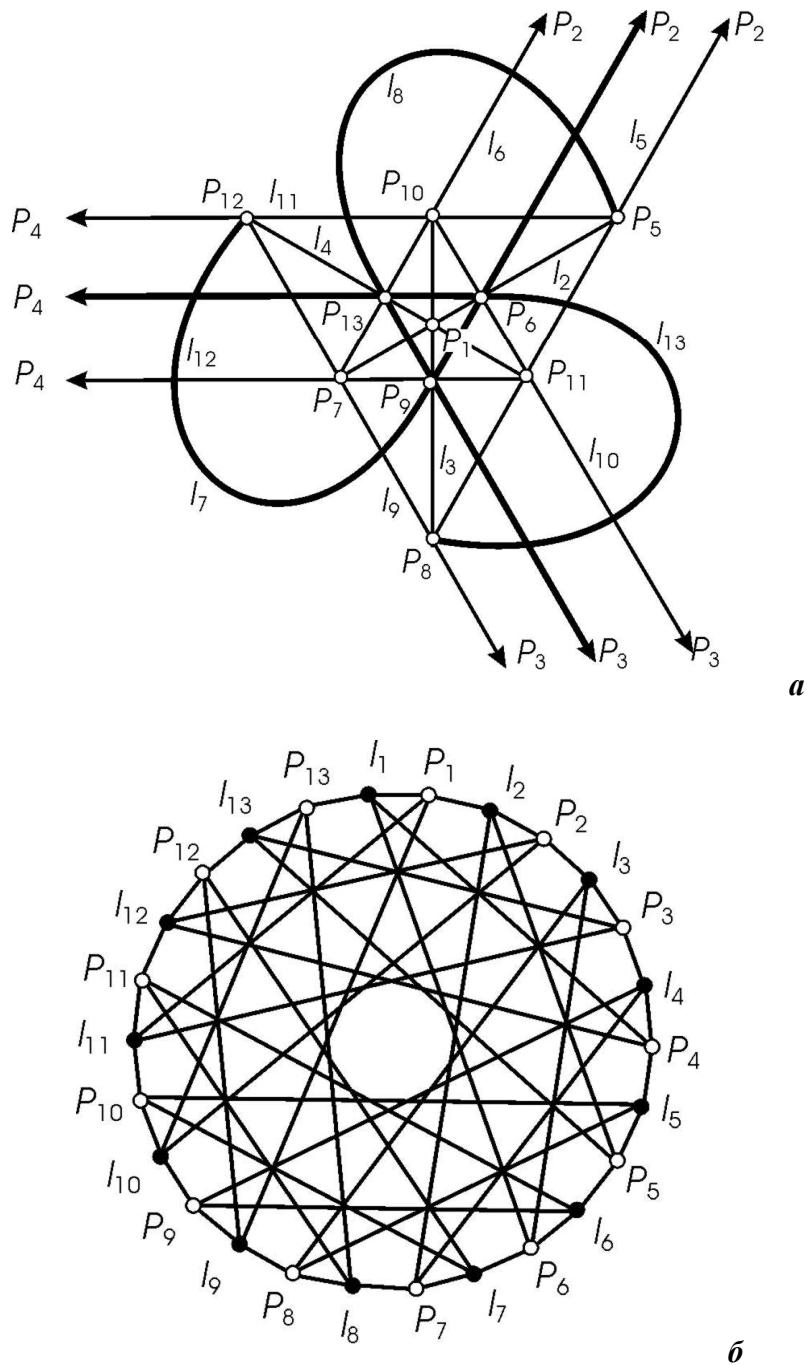


Рис.1.25. Графическая модель конечной проективной плоскости $PG(2,3)$ и соответствующий ей граф инцидентности [21].

а - $PG(2,3)$ как расширение конечной евклидовой плоскости $EG(2,3)$, состоящей из 32 неидеальных точек P_5, \dots, P_{13} . Идеальные точки $P_1, P_2 \dots P_4$ образуют (не представленную на рисунке) идеальную прямую l_1 ; l_7, l_8, l_{13} – диагональные “прямые”.

б - Граф инцидентности $PG(2,3)$ как регулярный бихроматический гамильтонов граф степени 4=3+1 и обхвата 6, имеющий наименьший возможный порядок $2(32+3+1)=72$.

Автоморфизмом, или взаимно–однозначным отображением $PG(2,q)$ на себя является такое преобразование, при котором образы трех точек тогда и только тогда принадлежат одной прямой, когда сами эти точки принадлежат одной прямой. Такие автоморфизмы называются коллинеациями. Рассмотрим их подробно на примере $PG(2,3)$. На рис.1.25 три идеальные точки показаны стрелками, идеальная прямая $l_1=\{P_1, P_2, P_3, P_4\}$ не показана. Подстановка $\pi_1=(1,7,8,10,2,11,6,12) \ (3,9,13,5) \ (4)$ является коллинеацией (и однозначно определяет подстановку прямых $\lambda_1=(1,12,13,11) \ (2,9,3,6,5,10,7,4) \ (8)$, которая является той же коллинеацией), при этом $P_4 \rightarrow P_4$, $l_8 \rightarrow l_8$, т.е. P_4 и l_8 – неподвижная точка и прямая коллинеации π . При коллинеации $\pi_2 = (1) \ (2,3) \ (4) \ (5,12) \ (6,13) \ (7,11) \ (8) \ (9) \ (10)$ и индуцированной ей $\lambda_2 = (1) \ (2,4) \ (3) \ (5,9) \ (6,10) \ (7,8) \ (11) \ (12) \ (13)$, все четыре прямые $l_1, l_{11}, l_{12}, l_{13}$, проходящие через неподвижную точку P_4 неподвижны. В этом случае P_4 – центр коллинеации, а l_3 (на которой лежат неподвижные точки P_1, P_8, P_9, P_{10}) – ось коллинеации. Если центр лежит на оси, то коллинеацию называют элацией (или проективным сдвигом), в противном случае – гомологией [21].

Подплоскостью плоскости $PG(2,Q)$ называется $PG(2,q)$, точки и прямые которой являются подмножествами соответствующих множеств $PG(2,Q)$. Согласно теореме Брука [21], $PG(2,Q)$ может иметь подплоскость $PG(2,q)$ при $Q = q^2$ или $Q \geq q^2+q$. Поскольку $PG(2,6)$ не существует, то

$$PG(2,2) \subset PG(2,2^2), \quad PG(2,7), \quad PG(2,2^3), \dots; \quad PG(2,3) \subset PG(2,3^2) \dots$$

Множество из m точек и n прямых (плоскостей), в котором через каждую точку проходит s прямых (плоскостей), а на каждой прямой (плоскости) лежат d точек, называется конфигурацией. Конфигурация обозначается (m_c, n_d) , если $m = n$, то конфигурация является самодуальной и обозначается n_d . Конфигурация определяется своей таблицей инцидентности $\Gamma(m_c, n_d)$ из m строк и n столбцов, содержащей $m \cdot s = n \cdot d$ знаков инцидентности. Конфигурация может быть реализована в различных (конечных или бесконечных) пространствах; для реализации на какой–либо проективной плоскости она должна быть геометрической, т.е. $\Gamma(m_c, n_d)$ во всякой своей подтаблице 2×2 должна иметь одну пустую клетку. (Это обеспечивает пересечение двух различных прямых проективной плоскости в лишь в одной точке). Если при добавлении нескольких знаков инцидентности в $\Gamma(m_c, n_d)$ получаемая конфигурация останется геометрической, то мы получаем расширенную конфигурацию, содержащую разное число знаков в строках и столбцах таблицы [146].

Плоские конфигурации удобно представлять в форме вписанных друг в друга n –угольников. Так, например, теорема Дезарга может быть переформулирована в теорему,

согласно которой на классической проективной плоскости существует два пятиугольника, вписанные друг в друга (т.е. установлено взаимно-однозначное соответствие между сторонами одного и вершинами другого пятиугольника, при котором каждая сторона проходит через соответствующую вершину). Эта конфигурация двойного пятиугольника 10_3 , вершины которой занумерованы числами от 1 до 10, может рассматриваться и как конфигурация, состоящая из пары треугольников $\{5,6,7\}$ и $\{8,9,10\}$ перспективных относительно центра (перспективы) 1 и оси (перспективы) $\{2,3,4\}$. Конфигурация 10_3 называется обыкновенной дезарговой конфигурацией (рис.1.26). При условии сохранения геометричности она может быть расширена посредством добавления 1, 2, 3 и 4-х знаков инцидентности [21].

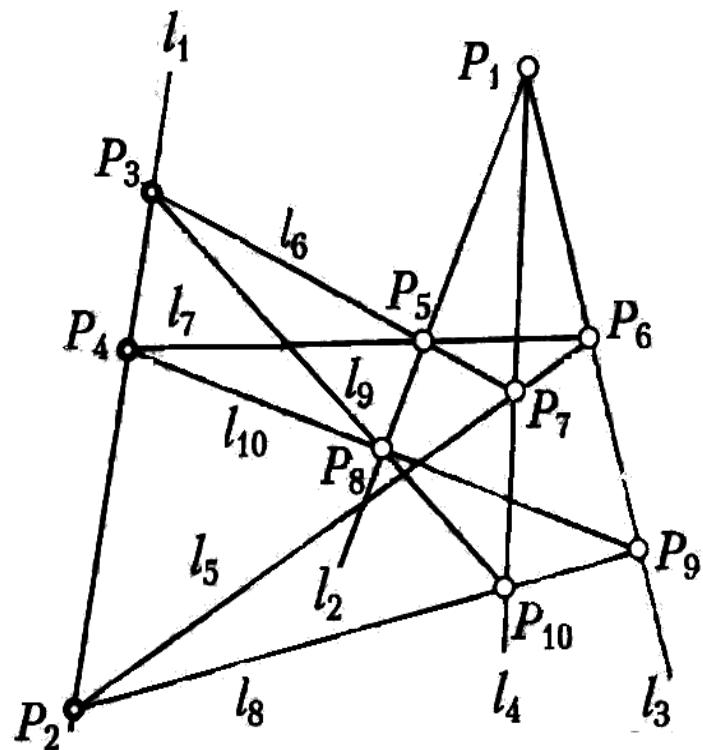


Рис.1.26. Конфигурация Дезарга 10_3 [21, 146]

Если из $\Gamma(q)$ вычеркнуть строку l_1 (идеальную прямую) и столбцы (идеальные точки) P_1, P_2, \dots, P_{q+1} , то мы получим ассоциированную таблицу $\Gamma^1(q)$, определяющую аффинную плоскость $AG(2,q)$, ассоциированную с данной $PG(2,q)$. Эта плоскость состоит из q^2 точек и $q^2+q=q(q+1)$ прямых, которые могут быть разбиты на $q+1$ класс так, что любые две прямые одного класса параллельны, а любые две прямые разных классов пересекаются. «Обратный» переход от $AG(2,q)$ к ассоциированной с ней $PG(2,q)$ осуществляется наложением условия пересечения всех прямых одного класса $AG(2,q)$ в одной точке [21].

Так, например, $\Gamma^1(2)$ состоит из $2^2 = 4$ точек и $2^2 + 2 = 6$ прямых, каждая “прямая” состоит из двух точек и через каждую точку проходит 3 прямых. Иными словами, мы получили конфигурацию $\{4_3, 6_2\}$, описывающую собственный четырехугольник или вершины и ребра тетраэдра. $AG(2,4)$ состоит из $4^2 = 16$ точек и $4^2 + 4 = 20$ прямых; каждая прямая состоит из 4-х точек и через каждую точку проходят 5 прямых; 16 точек $AG(2,4)$ образуют дополнение октады.

Итоговая таблица 1.3, содержащая наиболее симметричные конфигурации, представлена ниже.

Таблица 1.3. Самодуальные конфигурации [147].

Конфигу- рация n_d	Пространство	Порядок группы	Граф или карта	Охват m	Регуляр- ность s	Количество цепей из s - ребер $2(d-1)^{s-1}dn$
Фано 7_3	$PG(2,2)$	336	$\{6, 3\}_{2,1}$	6	4	336
Мёбиуса- Кантора 8_3	Комплексная плоскость	96	$\{8\} + \{8/3\}$	6	2	96
Паппа 9_3	Действительная плоскость	216	$\{6, 3\}_{3,0}$	6	3	216
Дезарга 10_3	Действ. плоск.	240	$\{10\} + \{10/3\}$	6	3	240
Новая 12_3	Действ. плоск.	144	$\{12\} + \{12/5\}$ или $\{6, 3\}_{2,2}$	6	2	144
Кремона- Ричмонд 15_3	Действ. плоск.	1440	граф Тутте	8	5	1440
3_3	3-мерн. простр.	72	$\{6, 3\}_{1,1}$	4	3	72
4_4	3-мерн. простр.	1152	$\{4, 4\}_{2,2}$	4	3	288
Тетраэдр 4_3	3-мерн. простр.	48	$\{6, 3\}_{2,0}$	4	2	48
Мебиуса 8_4	3-мерн. простр.	384	$\{4, 4\}_{4,0}$	4	2	192
Кокса $(2^{d-1})_d$	3-мерн. простр.	$2^d d!$	γ_d	4	2	$2^d d(d-1)$
Куммера 16_6	3-мерн. простр.	23040	$\gamma_6/2$	4	2	960
Стефано 12_6	3-мерн. простр.	1152	$2\{3, 4, 3\}/2$	4	1	144
Симплекс 5_4	4-мерн. простр.	240	$\{4, 4\}_{3,1}$	4	2	120

1.6. Алгебраические группы

1.6.1. Группы $PSL(2,p)$, $p = 3, 5, 7, 11$

В общем случае проективное преобразование $P((x,y))$ проективной плоскости $PG(2,K)$ определяется обратимой 3×3 матрицей M дробно–линейного преобразования. Все подстановки n – элементного множества образуют полную группу подстановок S_n порядка $n!$. Множество всех коллинеаций $PG(2,q)$ составляет подгруппу $P^{col}(2,q)$ группы S_n , порядок $P^{col}(2,q) = m(q^2+q+1)(q+1)q^3(q+1)^2$, где $q = p^m$, p – простое число. Согласно Эрлангенской программе Ф. Клейна, конечная проективная геометрия сводится к изучению групп коллинеаций. Коллинеации, квадраты которых являются тождественной коллинеацией, называются инволюциями, в силу связи с группами отражений (простейшая инволюция – плоскость отражения) они имеют глубокий геометрический смысл.

В $P^{col}(2,q)$ можно выделить подгруппу $P_1^{col}(2,q)$, сохраняющую идеальную прямую в $PG(2,q)$ и изоморфную $A^{col}(2,q)$ – группе аффинных коллинеаций конечной аффинной плоскости $AG(2,q)$, ассоциированной с $PG(2,q)$. В общем случае $A^{col}(n,q)$ является подгруппой $P^{col}(n,q)$ и содержит подгруппу $A_o(2,q) = GL_n(q)$, которая оставляет некоторую выделенную точку на месте. Прямые из $AG(n,q)$, проходящие через эту точку, составляют $PG(n-1,q)$, группа $P^{col}(n-1,q)$ которой содержит подгруппу проективных коллинеаций $PGL_n(q)$, изоморфную фактор–группе $GL_n(q)$ по центру. $PGL_n(q)$ является подгруппой индекса m в группе $P^{col}(n-1,q)$.

Группа $GL_n(q)$ – это множество матриц $n \times n$ с ненулевыми определителями; матрицы с определителем 1 составляют в $GL_n(q)$ нормальную подгруппу $SL_n(q)$, фактор–группа которой по центру изоморфна группе $PSL_n(q)$ или $LF_n(q)$. Порядок Ω группы $GL_n(q)$ определяется соотношением:

$$\Omega = (q^n - 1)(q^n - q)(q^n - q^2) \dots (q^n - q^{n-1}). \quad (1.17)$$

Группы $PGL_n(q)$, $SL_n(q)$ и $PSL_n(q)$ имеют порядок $\Omega/(q-1)$, $\Omega/(q-1)$ и $\Omega/(q-1)d$, где $d = (n, q-1)$ – наибольший общий делитель. Соотношения между вышеопределенными группами могут быть представлены в виде следующей схемы:

$$\begin{array}{ccccccc} P^{col}(n,q) & \Rightarrow & A^{col}(n,q) & \supset & A_o^{col}(n-1,q) = GL_n(q) & \triangleright & SL_n(q) \\ \cup & & & & \downarrow & & \downarrow \\ P^{col}(n-1,q) = PGL_n(q)C_m & \supset & PGL_n(q) & \leftrightarrow & GL_n(q)/Z & \quad PSL_n(q) \leftrightarrow SL_n(q)/Z, \end{array} \quad (1.18)$$

где C_m – циклическая группа, Z – центр группы. Группа $GL_n(q)$ является множеством матриц $n \times n$ с ненулевыми определителями; матрицы с определителем 1 составляют в $GL_n(q)$ нормальную подгруппу $SL_n(q)$, фактор–группа которой по центру изоморфна группе $PSL_n(q)$ или $LF_n(q)$. Порядок Ω группы $GL_n(q)$ описан соотношениями раздела 7.4 работы [22, с.135].

При аффинных коллинеациях из группы $A^{\text{кол}}(n,q)$ сохраняется параллельность прямых; если центр и ось коллинеации являются идеальной точкой и прямой $PG(n,q)$, то коллинеация называется переносом; если центр коллинеации идеальная точка и лежит на оси коллинеации, которая не является идеальной прямой, то это – аффинный сдвиг. Например, на рис.1.25 $AG(2,3)$ задается точками P_5, P_6, \dots, P_{12} и прямыми l_2, l_3, \dots, l_{13} . Отображение точек $\pi = (5,7,6) (8) (9) (10) (11,12,13)$ и индуцированное им отображение прямых $\lambda = (2) (3) (4) (5,9,13) (6,10,11) (8,12,7)$ является аффинным сдвигом [21].

При $q = p$, $PGL_2(q) = P^{\text{кол}}(1,q)$ – группа коллинеаций проективной прямой $PG(1,q) = PL(q)$, содержащей $q+1$ точку, из которых q соответствуют q элементам $GF(q)$, а одна (обозначаемая символом ∞) – идеальной точке. Например, $PL(4)$ – проективная (идеальная) прямая на рис.1.24. На проективной прямой $PL(q)$ группа $PSL_2(q) = L_2(q)$ превращается в группу дробно–линейных преобразований, порождающую преобразованиями:

$$\alpha: x \rightarrow x+1, \quad \beta: x \rightarrow kx, \quad \gamma: x \rightarrow x^{-1}; \quad (1.19)$$

и только при $q = 3, 5, 7, 11$ группа $L_2(q)$ имеет транзитивные представления перестановками ровно q элементов, причем в каждом из этих случаев эти q элементов могут быть инволюциями, переставляющими $(q+1)$ точку [16].

Для некристаллографической группы симметрии $L_2(7)$ соотношение (1.19) конкретизируется в форме порождающих дробно линейных преобразований $\omega \rightarrow -1/\omega$ и $\omega \rightarrow (\omega - 1)/\omega$ порядков 2 и 3, соответственно. Их произведение $\omega \rightarrow \omega + 1$ имеет порядок 7.

Дробно-линейному преобразованию $z \rightarrow (az+b)/(cz+d)$ сопоставляется матрица $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ с единичным определителем. Множество 168 таких матриц образует проективную специальную линейную группу $PSL(2,7)$, действующую на проективную прямую из 7+1 элемента $z = x/y$. Эта группа обладает 6 классами сопряженных элементов, представителями которых являются элементы

$$g_1 = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}, \quad g_2 = \begin{pmatrix} & -1 \\ 1 & \end{pmatrix}, \quad g_3 = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ & 2 \end{pmatrix}, \quad g_4 = \begin{pmatrix} 2 & \\ & 4 \end{pmatrix}, \quad g_5 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ & 1 \end{pmatrix}, \quad g_6 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ & 1 \end{pmatrix}$$

порядков 1, 2, 4, 3, 7, 7. Группа $PSL(2,7)$ изоморфна группе из 168 перестановок 7 чисел, представленных на рис.1.27.

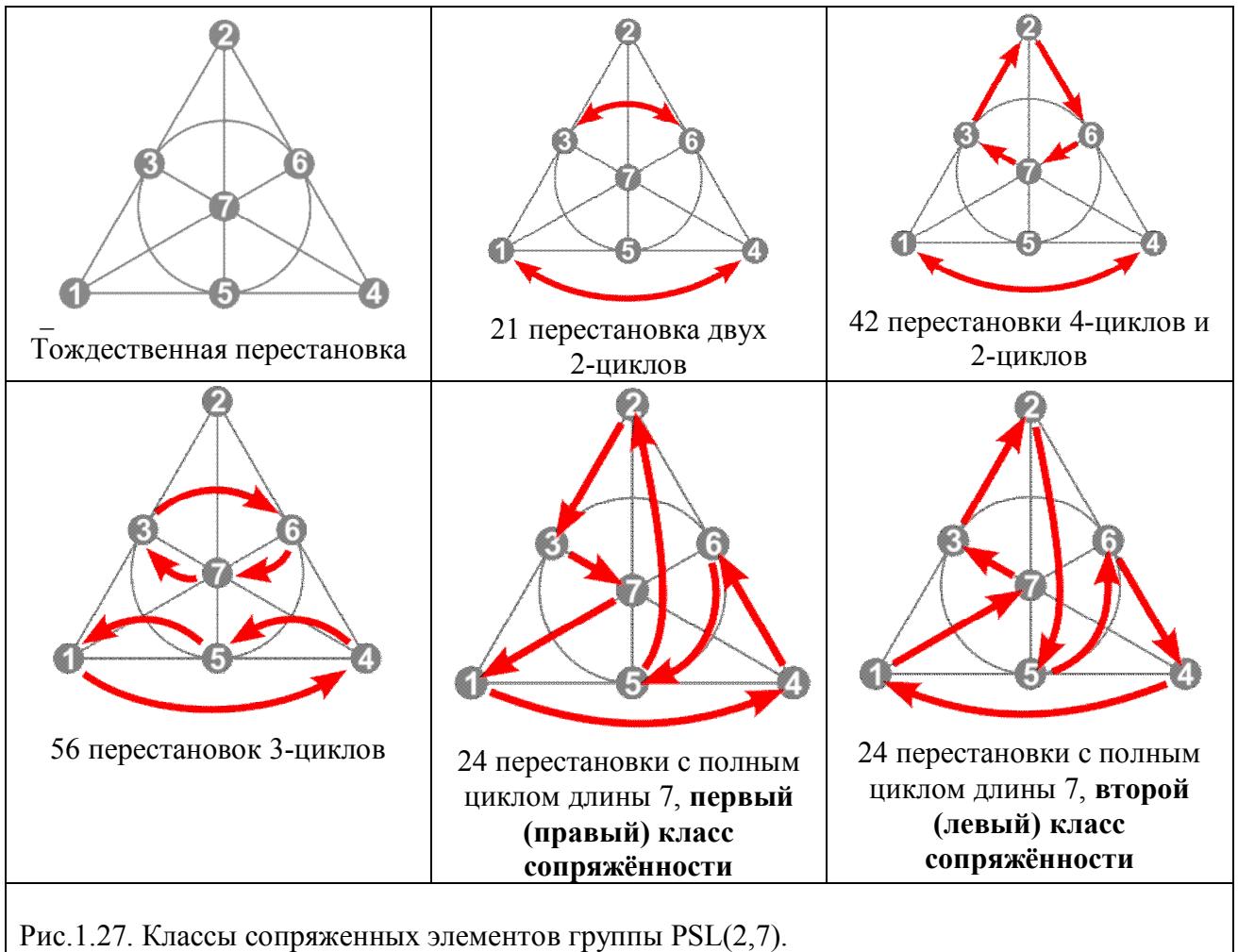
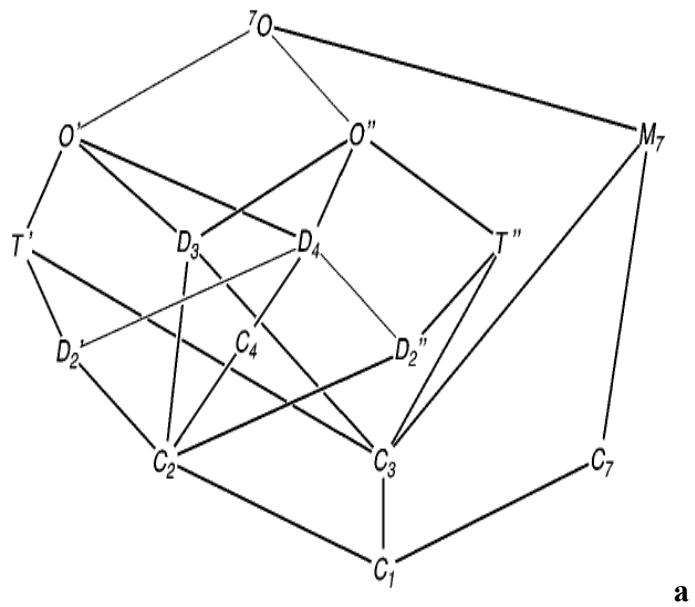


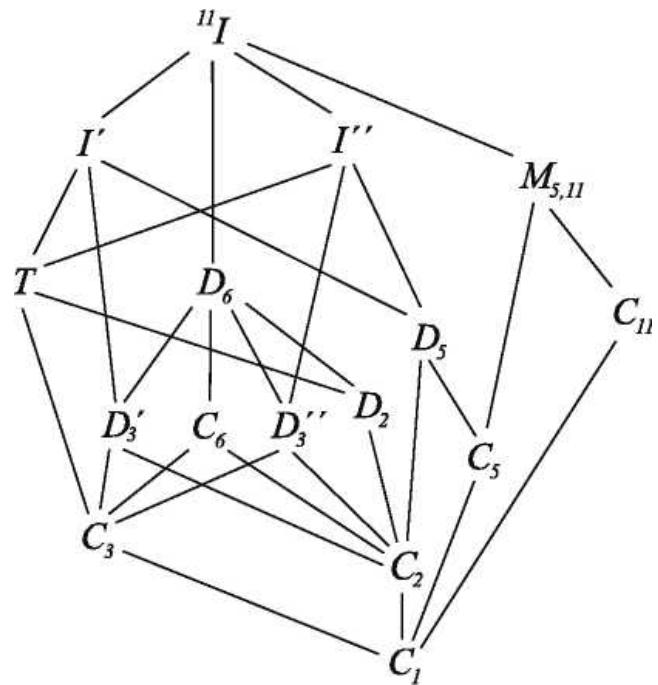
Рис.1.27. Классы сопряженных элементов группы $\text{PSL}(2,7)$.

Групп-подгрупповые соотношения для $\text{PSL}_2(7)$ или ^7O представлены на рис. 1.28 а.

В качестве примера рассмотрим и проективную специальную линейную группу $\text{PSL}_2(11)$ или ^{11}I генеалогическое древо которой представлено на рис.1.28б. Данная группа имеет 4 максимальные подгруппы I' , I'' , D_6 , $M_{5,11}$. Всего существует 2 класса подгрупп (по 11 в каждом), сопряженных группе вращений икосаэдра и несопряженных друг другу внутри ^{11}I . Подгруппы внутри каждого из классов, сопряжены элементами C_{11} . Сопряжение обоих классов происходит плоскостью симметрии θ , входящей в полную группу $^{11}I_d$. Третий класс максимальных подгрупп содержит 55 групп D_6 . Четвертый класс состоит из 12 метациклических групп $M_{5,11}$, которые неизоморфны никакой точечной группе [148]. Группу $\text{PSL}_2(11)$ можно представить в виде произведения точечной группы Т и неточечной группы $M_{5,11}$: $\text{PSL}_2(11) = T \cdot M_{5,11}$.



a



б

Рис.1.28. Групп-подгрупповые соотношения в проективных специальных линейных группах: **(а)** $\text{PSL}_2(7)$ или ${}^7\text{O}$ и **(б)** $\text{PSL}_2(11)$ или ${}^{11}\text{I}$ [148].

Пусть ГЦК-решетка $A_3 = D_3$ порождается векторами $\{A, B, C\}$, а $2D_3 = \{2A, 2B, 2C\}$, где $A=(a+b)/2$, $B=(b+c)/2$, $C=(a+c)/2$. Фактор-группа $D_3/2D_3$ является элементарной абелевой группой $2^3 = C_2 \times C_2 \times C_2$, состоящей из 8 элементов $\{0, A, B, C, A+B, A+C, B+C, A+B+C\}$ по модулю $2D_3$ (т.е. $A+A=2A(\text{mod } 2D_3)=0$, $A+(A+B)=2A+B(\text{mod } 2D_3)=B$ и т.д.) и представляющей собой группу аффинных сдвигов-инволюций. Сопоставление элементам группы 2^3 точек $\{\infty, 3, 5, 0, 6, 2, 1, 4\}$ проективной прямой $\text{PL}(7)$, показывает, что порожденная отображениями α, β ,

γ (1.19) группа $L_2(7)$ расширяет ее до полуправого произведения $F = 2^3 s L_2(7)$. Однако для 2^3 существует и расширение посредством группы $L_3(2)$, сохраняющей точку ∞ и действующей автоморфизмами на $PG(2,2)$. Группы $L_3(2)$ и $L_2(7)$ изоморфны; $L_2(7)$ – это группа автоморфизмов $AutH_7$ кода Хеминга H_7 , ее порядок – 168, а генетический код:

$$S^7 = T^2 = (ST)^2 = (S^4T)^4 = E, \quad (1.20)$$

где $S = R_2R_3$, $T = R_3R_4$, R_1, R_2, R_3 – отражения относительно гиперболической плоскости.

Таким образом, для F существует внешний автоморфизм θ , такой [16], что:

$$F = 2^3 s L_2(7) \leftrightarrow F^\theta = 2^3 s L_2^\theta(7) = 2^3 s L_3(2) \subset A_8, \quad (1.21)$$

где A_8 – знакопеременная группа, $L_2(7) \cap L_3(2) = L_2(2) = L_2^\theta(2)$ – группа 6 порядка, изоморфная точечной группе C_{3v} . Соотношение (1.21) означает, что группа F обладает двумя различными (транзитивным и нетранзитивным) точными представлениями на 8 элементах.

Векторы $\{A, B, C, A+B, A+C, B+C, A+B+C\}$ проведены из начала координат в вершины ромбоэдра (при $A = a, B = b, C = c$ – в вершины куба), группой перестановок всех вершин которого является симметрическая группа S_8 порядка $8!$. Эта группа содержит подгруппу A_8 индекса 2 (A_8 изоморфна $L_4(2)$), которая содержит сопряженные подгруппы F индекса 15. Максимальной кристаллографической подгруппой S_8 является группа куба – $2^3 s L_2(2) \leftrightarrow D_{2h} s C_{3v}$ порядка 48, т.о. между "избыточным" уровнем групп перестановок (порядок $S_8 = 840 \cdot 48$) и уровнем кристаллографических групп находится уровень групп коллинеаций (порядка 2848):

$$\begin{aligned} 2^2 s C_3 &\subset 2^3 s L_3(2) \subset L_4(2) \leftrightarrow A_8 \\ &\cap \qquad \cup \qquad \qquad \qquad 1.22) \\ L_2(2)s2 &\subset 2^2 s L_2(2) \subset 2^3 s L_2(2) \subset 2^3 s L_2(7), \end{aligned}$$

где $L_2(2) \leftrightarrow C_{3v}$, $2sL_2(2) \leftrightarrow D_{3d}$, $2^2 s C_3 \leftrightarrow T$; исключительный изоморфизм групп $L_2(7)$ и $L_3(2)$ обеспечивает возможность перехода от 3–мерного аффинного пространства $A(3,K)$ к $PG(2,q)$ и наоборот.

Группа $L_4(2)$ порядка 712024 определена в 4–мерном аффинном пространстве и содержит подгруппу, изоморфную Y' – бинарной икосаэдрической группе. Если ГЦК–решетка – это $\Lambda_3 = D_3$, алмаз – это упаковка $D_3^+ = D_3 \cup [1]D_3$, то $E_8 = D_8^+$ – это 8–мерная

алмазная решетка, в которой каждый шар окружен 240 шарами. Кристаллографическая решетка корней E_8 – уникальная конструкция алгебраической геометрии, которая определяет максимальную особую простую алгебру Ли e_8 и отображается на себя точечной группой порядка $696729600 = 2^{14} \times 3^5 \times 5^2 \times 7$ [16].

1.6.2. Группы Матье

Группа Матье M_{12} порождена отношениями $\gamma_i\gamma_j^{-1}$, т.е. M_{12} множество перестановок вида закрутить - раскрутить вершин икосаэдрического варианта кубика Рубика, в котором «закрутки» γ_i и «раскрутки» γ_i^{-1} физически возможны. Закрутка вокруг вершины с последующей раскруткой вокруг противоположной вершины есть порождающее вращение икосаэдра. Таким образом, группа вращений икосаэдра содержится в нашей группе M_{12} . Все максимальные подгруппы групп Матье M_{23} , M_{22} , M_{12} , M_{11} также известны. В работе [16] приведены их описания.

Если построить трехмерную решетку L над икосианами, состоящую из всех векторов (x,y,z) , удовлетворяющих условиям: $x \equiv y \equiv z \pmod{h}$, $x+y+z=0 \pmod{\bar{h}}$, $h = \tau = \frac{1}{2}(-\sqrt{5}, 1, 1, 1)$, $h \bar{h} = 2$, то в евклидовой метрике L – это копия 24-мерной решетки Лича Λ_{24} , предельно возможной в последовательности слоистых решеток. Подгруппой группы автоморфизмов Λ_{24} является группа Матье M_{24} порядка $(16 \cdot 1/2 \cdot 8!) \cdot 759$, которая транзитивна на множестве элементов из 759 октад двоичного кода Голея ε_{24} (стабилизатором октады является группа $2^4 \times L_4(2)$). Группа M_{24} содержит в качестве подгруппы и $L_3(2^2)$, которая содержит $L_3(2)$. Таким образом, соотношения (1.22) для группы $L_3(2)$ могут быть дополнены:

$$\begin{aligned} L_2(7) &\supset L_2(2) \subset L_3(2) \subset L_3(2^2) \\ &\cap \\ O \times Y' / Z_2 &\subset L_4(2) \subset M_{24} \end{aligned} \tag{1.23}$$

Соотношения (1.22), (1.23) определяют связь (под)групп автоморфизмов (конечных) проективных геометрий $PG(2,q)$, правильных разбиений S^3 , E^3 и H^3 – политопов и сот в E^4 и n -мерных ($n \leq 24$) слоистых решеток Λ_n .

Таким образом, в настоящей главе приведены основные математические конструкции, которые будут использоваться (в той или иной форме) в последующих главах.

Глава 2. Некристаллографическая симметрия цепей правильных тетраэдров: базовая структурная единица - тетраблок

2.1. Введение

Центральное место в классической кристаллографии занимает теория пространственных групп [19, 149, 150], которые описывают структуру идеальных кристаллов.

2.1.1. Преобразования евклидова пространства

Для обсуждения нескольких дальнейших вопросов необходимо привести ряд сведений из геометрии [15, 151]. Согласно теореме Лиувилля, всякое гладкое конформное преобразование области евклидова (псевдоевклидова) пространства размерности $n \geq 3$ является суперпозицией движения, дилатации и инверсии; для обеспечения гладкости преобразования требуется не менее четырех непрерывных производных у функций, задающих отображение [15, Том.1, с.108; 152, р.2]. Преобразования называются конформными, если при этих преобразованиях метрика g_{ij} в пространстве размерности n с координатами x^1, \dots, x^n (или области пространства) умножается на число $\lambda(x)$, т.е. $g'_{ij}(x) = g_{ij}(x) \cdot \lambda(x)$. Метрика g_{ij} задана, если формула для квадрата длины вектора s имеет вид $|s|^2 = \sum_{i,j} g_{ij} s^i \cdot s^j$, где s^1, \dots, s^n – компоненты s в данной системе координат x^1, \dots, x^n [15, Том.1, с.33]. Совокупность всех движений образует группу. Пусть $n = 3$. Если метрика является евклидовой, то $g_{ij} = \delta_{ij}$, где δ_{ij} – символ Кронекера ($\delta_{ij} = 1$, если $i = j$, и $\delta_{ij} = 0$, если $i \neq j$). Порождающими элементами группы движений являются сдвиги $x \rightarrow x + x_0$ (где $x_0 = \text{Const}$ – вектор сдвига), вращения $x \rightarrow [\mathbf{A}]x$ (где $[\mathbf{A}]$ – матрица вращения) и зеркальные отражения $(x^1, x^2, x^3) \rightarrow (x^1, x^2, -x^3)$ или $(x^1, x^2, x^3) \rightarrow (x^1, -x^2, x^3)$ или $(x^1, x^2, x^3) \rightarrow (-x^1, x^2, x^3)$. **Полная группа движений** трехмерного евклидова пространства (E^3) получается из винтовых движений (вращений со сдвигом и, в частности, вращений и сдвигов), зеркальных вращений (зеркальных отражений с вращением) и скользящих отражений (зеркальных отражений со сдвигом) [15, Том.1, с.36], т.е.

$$x \rightarrow [\tilde{\mathbf{A}}]x + x_0, \quad (2.1)$$

где $[\tilde{\mathbf{A}}]$ – матрица вращения или зеркального вращения. Все эти движения оставляют неизменными углы и расстояния между всеми точками (движения – это *жесткие* преобразования, т.е. преобразования без деформации).

Нежесткими преобразованиями, т.е. преобразованиями с деформацией, являются дилатации (преобразования растяжений-сжатий)

$$x \rightarrow \rho \cdot x, \quad (2.2)$$

где $\rho = \text{Const} > 0$, и инверсии - обратные преобразования [15, Том.1, с.108, с.110]

$$x^i \rightarrow \frac{x^i - x_0^i}{\sum_{j=1}^3 (x^j - x_0^j)^2}, \quad (2.3)$$

где $i = 1, 2, 3$, или

$$x \rightarrow \frac{x - x_0}{|x - x_0|^2}. \quad (2.3')$$

Отметим, что отображение (2.3) (или (2.3')) не определено для $x = x_0$; это затруднение, однако, убирается присоединением точки “на бесконечности”, которая будет служить отображением x_0 .

Решеткой кристалла в E^3 называется совокупность всех атомов кристалла [15, Том.1, с.136]. Пусть L – это решетка в пространстве E^3 , $L = \sum_{i=1}^3 Z \cdot e_i$, где Z – множество целых чисел;

e_1, e_2, e_3 – некоторый базис. Отметим, что геометрия (икосаэдрических) квазикристаллов может быть рассмотрена в качестве проекции из решетки в 6-мерном евклидовом пространстве E^6 в пространство E^3 [153]. Рассматриваются только трансляционно-инвариантные решетки. Решетка L называется трансляционно-инвариантной, если она переходит в себя при произвольной трансляции вида $n_1 \cdot a_1 + n_2 \cdot a_2 + n_3 \cdot a_3$ (где n_1, n_2, n_3 – произвольные целые числа; a_1, a_2, a_3 – трансляции вдоль векторов e_1, e_2, e_3 , соответственно), и ни при какой другой трансляции [15, Том.1, с.137].

Известно, что требование, чтобы решетки были трансляционно-инвариантными, накладывает весьма жесткие ограничения на группы, которые могут быть группами симметрии некоторой решетки L . В частности, если L – трансляционно-инвариантная решетка, то *стационарная* группа решетки L (состоящая из всех преобразований, сохраняющих решетку и оставляющих неподвижной точку O – центр вращений) состоит из конечного числа преобразований, каждое из которых является поворотом вокруг некоторой оси, проходящей через точку O , на угол, кратный либо $\pi/3$, либо $\pi/2$ [15, Том.1, с.143]. В результате этого углы вращения могут быть равны только $\pi/3, 2\pi/3, \pi/2$ и π , т.е. оси вращения C_n могут быть только 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядка [15, Том.1, с.150; 154, с.72]; эти оси являются “кристаллографическими” поворотными осями.

2.1.2. Кристаллографическая и некристаллографическая симметрия

Итак, из всех возможных преобразований пространства E^3 только жесткие преобразования (**движения**: винтовые движения, зеркальные вращения и скользящие отражения) **в тех случаях**, когда решетки остаются трансляционно-инвариантными, относятся к преобразованиям **кристаллографической** симметрии. Иначе говоря, классическая теория симметрии кристаллов – это теория симметрических преобразований в себя пространства E^3 при наличии определенных ограничений, накладываемых существованием кристаллической решетки [154, с.37]. Пространственные группы (230 групп) можно определить как группы или подгруппы преобразований симметрии, совмещающие (периодические в трёх измерениях) решетки с собой. Такая возможность существует на основании теоремы Фробениуса (всякая пространственная группа есть подгруппа полной группы преобразований некоторой решетки) [155].

Пространственная группа отображает на себя и атомы кристалла, и евклидово пространство в целом. Важно отметить, что был предложен алгоритм (алгоритм Цассенхауза [156], который позволяет получить все 230 пространственных групп как групп матриц. Таким образом, наличие пространственных групп не предполагает, что в пространстве существуют атомы и их взаимодействие: каждая группа - это набор матриц, полученный из чисто математических соображений. Итак, существование пространственной группы является **необходимым** условием существования кристалла в евклидовом пространстве, т.е. оно определяет **возможность** кристаллического упорядочения (хотя и **не является** условием **достаточным**, т.е. **не гарантирует**, что соответствующий кристалл будет существовать при данных физических условиях).

Инвариантность E^3 относительно всех 230 пространственных групп связана с нулевой кривизной пространства E^3 . Любую пространственную группу можно понимать как дискретную группу **движений** пространства E^3 [151, с.182]. Остальные преобразования пространства E^3 - это такие жесткие преобразования, при которых решетки не являются трансляционно-инвариантными, и все нежесткие преобразования (т.е. преобразования с деформацией) - дилатации и инверсии. Все они могут быть отнесены к преобразованиям **некристаллографической** симметрии; она может иметь место либо в пределах ограниченного объема вокруг некристаллографического элемента симметрии (такого как совокупность молекул, одиночная молекула, мономерная единица олигомерной молекулы, фрагмент молекулы) [157, р.248; 158, р.263], либо для неограниченного пространства (бесконечной структуры с самоподобием, фрактала, [159, р.117].

2.1.2.1. Кристаллографическая и некристаллографическая симметрия: определения.

Можно теперь дать **определение** операций кристаллографической и некристаллографической симметрии. Определение “операции **кристаллографической симметрии**”, согласно Международным таблицам кристаллографии [19, p.723], гласит: “Движение называется операцией кристаллографической симметрии, если существует кристаллографическое разбиение, для которого это движение является операцией симметрии”. Следовательно, можно дать следующее определение некристаллографической симметрии: “преобразование называется операцией некристаллографической симметрии, если не существует кристаллографического разбиения, для которого это преобразование является операцией симметрии”.

В этом определении использован термин “преобразование”, а не “движение”, поскольку операция некристаллографической симметрии допускает некоторые жесткие преобразования (движения, преобразования без деформации), и все нежесткие преобразования, т.е. преобразования с деформацией: они не являются движениями. Это определение операций **некристаллографической симметрии** охватывает, в частности, преобразования с любыми осями: например, с целочисленными, отличающимися от осей 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков (т.е. осями 5-го, 7-го, 8-го порядков и т.д.); нецелочисленными l/d (с углами поворота $360^\circ \cdot d/l$, где l и d – целые числа); осями, порядок которых иррационален. Именно в описанном здесь смысле термин “некристаллографическая симметрия” был ранее использован в работе [84]. Данное определение некристаллографической симметрии коррелирует также с трактовкой, использованной, например, в работах [157, p.248; 158, p.263; 160, p.362; 161, 162, 163].

Действительно, согласно концепциям, представленным в [157, p.249; 160, p.362], операции некристаллографической симметрии может описать соотношение

$$\mathbf{x}' = [\mathbf{C}]\mathbf{x} + \mathbf{d}, \quad (2.4)$$

где $\mathbf{x}'(x_1', x_2', x_3')$ и $\mathbf{x}(x_1, x_2, x_3)$ – векторы положения, $[\mathbf{C}]$ – матрица вращения (или зеркального вращения), и \mathbf{d} – вектор сдвига (трансляции); очевидно, что соотношение (2.4) эквивалентно соотношению (2.1). Соотношение (2.4) становится кристаллографической операцией в частном случае, когда оно справедливо по всей кристаллической решетке. Если к этим движениям (2.4) (жестким преобразованиям) мы добавим нежесткие преобразования: дилатации (2.2) и инверсии (2.3), то получим полный список преобразований некристаллографической симметрии.

2.1.2.2. Некристаллографическая симметрия: примеры.

Можно упомянуть примеры известных объектов или систем с некристаллографической симметрией:

- (а) молекула фуллерена C_{60} , одна из аллотропных форм углерода: наноуглеродная структура с положительной кривизной; группа симметрии фуллерена C_{60} – это точечная группа икосаэдра I_h [164], обладающая (некристаллографической) осью 5-го порядка;
- (б) плотноупакованная совокупность молекул C_{60} [165], т.е. фуллерит C_{60} , являющийся молекулярным кубическим кристаллом с молекулами фуллерена C_{60} в узлах его решетки; икосаэдрическая симметрия молекулы C_{60} не дает возможности реализовать трансляционную периодичность;
- (в) кубический кристалл β -Mn; в работе [166] локальная симметрия прямолинейных стержней из объединенных по граням тетраэдров в β -Mn описана с использованием трех взаимно перпендикулярных осей 8-го порядка;
- (г) молекулы с нецелочисленными осями, которые характерны для биополимеров [163; 167], например, молекула α -спирали; симметрия α -спирали была описана разными нецелочисленными (некристаллографическими) осями [168];
- (д) структура шварцита, являющаяся “сеткообразным” аллотропом углерода: наноуглеродная структура с отрицательной кривизной [169] - например, C_{168} , который имеет структуру с замкнутой оболочкой; одна из операций, которые порождают группу симметрии шварцита C_{168} , является отражением в гиперболической линии [170], и ее нельзя отождествить с плоскостью кристаллографической симметрии периодической решетки (очевидно, что она содержит дилатации, т.е. нежесткие преобразования);
- (е) фрактальная структура - объект, который является инвариантным при преобразовании ренормгруппы [159];
- (ж) спираль Бердийка-Коксетера [24, 171]; порядок оси этой спирали иррационален (рис.2.1).

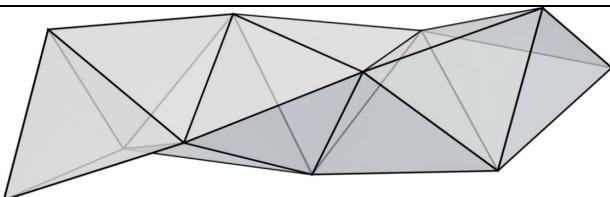


Рис.2.1. Линейная упаковка 8 правильных, объединенных по граням, тетраэдров; это фрагмент спирали Бердийка-Коксетера [24, 171]. Угол поворота пространственной спирали $\approx 131.81\dots^\circ$ - иррациональное число, поэтому трансляционный период этой спирали бесконечен, спираль непериодическая.

2.1.3. Подходы для описания некристаллографической симметрии структур

Для описания некристаллографической симметрии разных упорядоченных систем в литературе был предложен ряд подходов. Прежде всего, необходимо выявить ту группу, которой принадлежат некристаллографические преобразования данной структуры.

2.1.3.1. Политопный подход

В работе [6] было введено понятие “распространенный ближний порядок” (БП), которое выражает идею о том, что наличие БП вокруг определенного атома может вынудить образование БП вокруг соседних атомов. Ключевым, исходным наблюдением [172, 173] было то, что существует тип кристалла, строго соответствующий распространению БП: это кристалл в неевклидовом пространстве, - пространстве постоянной положительной кривизны, сфере S^3 [24]. Если упаковка является тетраэдрической (и содержит только правильные тетраэдры), то хорошим прототипом такого кристалла является многогранник (политоп) {3,3,5}. Обозначение {3,3,5} указывает на многогранник, в котором любая грань содержит 3 вершины, в каждой вершине сходятся 3 треугольника, у каждого ребра плотно размещаются 5 тетраэдров. В то время как правильные тетраэдры не могут плотно заполнить все 3-мерное евклидово пространство E^3 , они идеально заполняют 3-мерную сферу S^3 , на которой образуют правильный многогранник (политоп). Действительно, в правильном тетраэдре в пространстве E^3 двугранный угол равен $\approx 70.53^\circ$; он не является делителем 360° , поэтому идеальная упаковка таких тетраэдров в E^3 невозможна: у одного общего ребра можно расположить максимум 5 тетраэдров, и при этом остается угловой зазор между соседними тетраэдрами, равный 7.35° . Аналитически S^3 является многообразием,

$$\text{удовлетворяющим уравнению } \sum_{i=1}^4 x_i^2 = r^2 \text{ в пространстве } E^4. \text{ Для политопа } \{3,3,5\} \text{ } r = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \tau,$$

если длина ребра тетраэдра равна единице. Политоп {3,3,5} содержит 600 тетраэдров (5 у каждого ребра), 1200 треугольников, 720 ребер, 120 вершин; у каждой вершины - 12 соседних вершин [24]. Итак, основной мотивацией введения структуры политопа в качестве модели для описания локального порядка в упаковке правильных тетраэдров является то, что определенные типы “распространенного” БП совместимы со структурой политопа, хотя и не совместимы с дальнодействующим 3-мерным трансляционным порядком. Подход, описанный в [6, 172, 173], назовем “политопным”.

В работе [172] обсуждены способы отображения сферы S^3 и политопа {3,3,5} в **часть** (поскольку S^3 конечна) пространства E^3 (см. также [141, 174]), и результат этой операции. Вывод состоял в том, что “отображение S^3 на E^3 порождает упругие деформации

(искажения), которые сохраняют неизменным локальный икосаэдрический порядок”. Отображение исходной идеальной структуры, которое желательно получить, должно быть как можно более близким к изометрическому, но изометрическое отображение может быть достигнуто лишь локально. Идеальная структура имеющегося на S^3 “образца” может быть спроектирована в локальную структуру в пространстве E^3 прокатыванием (без скольжения) сферы S^3 по евклидовому многообразию вдоль фиксированной траектории [172]. Это утверждение следует обосновать.

Согласно работе [175, p.59], римановым многообразием (римановым пространством) называется многообразие, с которым связана метрика. Это означает, что в каждой части многообразия, представленного аналитически с помощью некоторой системы координат u^i , задана дифференциальная квадратичная форма $ds^2 = \sum_{i,j} g_{ij} du^i du^j$. Евклидова метрика,

соприкасающаяся в точке $A(u_0^i)$ с данной римановой (неевклидовой) метрикой, определяется [175, p.89] посредством линейного элемента (дифференциальной квадратичной формы) $d\sigma^2 = \sum_{i,j} \gamma_{ij} du^i du^j$, коэффициенты γ_{ij} которого и их частные производные первого порядка

имеют в точке $A(u_0^i)$ такие же численные значения, как и соответствующие величины данного линейного элемента риманова пространства. Существование соприкасающихся евклидовых пространств в данной точке А риманова пространства доказано [175, p.89-90]. Далее, можно получить евклидово пространство, соприкасающееся с римановым вдоль *кривой* [175, p.99], разворачивая кривую риманова пространства на пространство Евклида. Благодаря тому, что в каждой точке определена местная декартова система координат, оказывается, что этим развернута на евклидово пространство не только данная кривая (как таковая), но фактически вся бесконечно малая *область* риманова пространства, окружающая эту кривую. Соответствующее утверждение (теорема) гласит [175, p.99]: “существует евклидова метрика, соприкасающаяся с данной (римановой) метрикой вдоль всей данной кривой; существует евклидова метрика, или даже евклидово пространство, прикрепленное к данной кривой”. Эта теорема имеет ряд важных следствий. В первую очередь можно увидеть, что [175, p.101] “наблюдатель, который перемещается только вдоль данной кривой и ограничивается производством измерений в непосредственной близости от этой кривой, не будет в состоянии установить, что он находится вне евклидового пространства, пока он пренебрегает бесконечно малыми выше первого порядка”. Еще одно важное следствие этой теоремы состоит в том, что [175, p.101] “если в римановом пространстве рассматривается дуга кривой, бесконечно близкой к данной кривой, то длина этой дуги, измеренная с помощью римановой или евклидовой метрики, … является одной и той же, с точностью до бесконечно малых второго порядка. … Отображение риманова пространства на

соприкасающееся евклидово, таким образом сохраняет расстояния, измеренные в соседстве с заданной кривой, с точностью до бесконечно малых второго порядка". В итоге можно утверждать, что параллельный перенос векторов из одной точки любого Риманова многообразия в другую точку вдоль любого фиксированного пути является линейной изометрической операцией. Это – искомое обоснование цитированного метода [172] прокатывания (без скольжения) сферы S^3 по евклидовому многообразию вдоль фиксированной траектории.

Политопный метод оказался полезным для разных систем. Ряд структур пространств с ненулевой кривизной был использован для описания металлических сплавов с плотными упаковками атомов, полупроводников с ковалентными тетракоординированными связями, а также голубых фаз холестериков и лиотропных жидких кристаллов [176]. Эти системы не могут создать идеальной (совершенной) организации составных частей своей структуры в евклидовом пространстве, поскольку распространение их БП не было бы совместимым с топологией; увеличение протяженности локального порядка неизбежно ограничивается расстоянием, на котором возникающее напряжение становится слишком большим, и внутри материалов появляются дефекты. В то же время **общие особенности** этих структур могут быть поняты, если осознать, что в каждом случае в таком же пространстве с ненулевой кривизной S^3 могут быть созданы **идеальные** структуры без дефектов (**идеальные образцы**), требования упаковки которых совместимы с различными локальными упорядочениями этих разнообразных систем. На основе концепции распространения БП [6] было также исследовано несколько возможных непериодических тетраэдрических структур [177].

2.1.3.2. Подход более высоких размерностей

Второй подход – это “подход более высоких размерностей” [178, p.61]. Этот nD подход восстанавливает скрытые симметрии и взаимосвязи (корреляции) квазипериодических структур, используя отображения в пространство 3D из nD -решеток. Предельной является 8-мерная решетка E_8 [26]; она обеспечивает наиболее плотную упаковку твердых сфер в 8-мерном пространстве [16]. Отображение из E_8 дает квазипериодическую структуру в пространстве E^4 , которая обладает симметрией политопа $\{3,3,5\}$, и “резы” которой могут дать квазикристаллы меньшей (3D) размерности. Например, как отмечено выше, геометрия (икосаэдрических) квазикристаллов может быть рассмотрена в качестве проекции из решетки в 6-мерном евклидовом пространстве E^6 в пространство E^3 [153]. Структура кубического фуллерита C_{60} может быть описана как 2/1-аппроксимант икосаэдрического квазикристалла типа Бергмана [178, p.298].

2.1.3.3. Конструирование 3-мерных евклидовых сеток из 2-мерных неевклидовых разбиений

Третьим подходом можно назвать метод геометрического конструирования периодических 3-мерных евклидовых сеток проецированием 2-мерных разбиений гиперболической (H^2) и эллиптической (S^2) поверхностей на семейство периодических 3-мерных минимальных поверхностей [179 - 183]. Различные проекции простейших симметричных разбиений этих пространств в E^3 дают топологически и геометрически сложные структуры, включая многочисленные переплетенные сетки и запутанные сетки, которые *ab initio* в 3-мерном пространстве иначе создать трудно. В настоящее время предложены методы пересчета периодических структур, созданы базы данных, которые их содержат; все это дает информацию, необходимую для систематического конструирования разных кристаллических материалов.

2.1.3.4. Использование проективных специальных линейных групп

В перечисленных выше подходах для описания скрытой симметрии использовались некристаллографические группы (т.е. группы, не являющиеся подгруппами пространственных групп). Следует отметить, что существует бесконечно много некристаллографических точечных групп, представляющих интерес как отражающие возможные симметрии молекул и как приближенные симметрии локальных центров в кристаллах. Любая группа может быть представлена в виде подгруппы группы перестановок. Стандартными операциями в точечных группах симметрии можно считать специальные типы перестановок, применяемые к дискретным наборам точек или линий, таким как вершины или ребра, соответственно, многогранников. В этой связи точечные группы симметрии предстают как частные случаи групп перестановок. Например, T – это группа вращений тетраэдра, а I – икосаэдра. При этом группы T и I изоморфны проективным специальным линейным группам $PSL(2,3)$ и $PSL(2,5)$, соответственно. Из всех проективных специальных линейных групп можно выделить четыре, имеющие особый статус: $PSL(2,p)$ при $p = 3, 5, 7$ и 11 [16, с.333; 141, 148, 184, 185]. Они выделяются своей особой симметрией, т.к. действуют транзитивно на множества как порядка p , так и $p + 1$, - этого свойства нет в группах для простых чисел больше 11: соответствующие группы перестановок $PSL(2,p)$ транзитивны на наборах объектов $p + 1$, но не на наборах объектов p . Важно отметить, что, в отличие от групп $PSL(2,3)$ и $PSL(2,5)$, группа $PSL(2,7)$ порядка 168 и группа $PSL(2,11)$ порядка 660 [148, 170] не является изоморфной ни для какой точечной группы симметрии в 3-мерном пространстве. При $p = 5, 7$ и 11 группы $PSL(2,p)$ могут также рассматриваться как p -кратные расширения соответственно тетраэдрической, октаэдрической и икосаэдрической

точечных групп вращения. Такие свойства дают возможность использовать эти группы для решения структурных задач, рассматриваемых ниже. В частности, симметрия шварцита C_{168} описывается с помощью группы $PSL(2,7)$ [170].

2.1.3.5. Описание некристаллографической симметрии: основная концепция

Итак, каждый из упомянутых выше вариантов отображения позволил выявить (для реальной структуры или ее фрагмента) “идеальные прототипы”: они обладают высокой (в общем случае, некристаллографической) симметрией, а различия с реальными структурами лежат в физически допустимых пределах. Но для того чтобы в реальных структурах осуществились, в том или ином виде, “идеальные прототипы”, наличие последних является лишь **необходимым** (но **не достаточным**) условием. Роль некристаллографических групп симметрии в осуществлении реальных **структур** аналогична вышеупомянутой роли пространственных групп классической кристаллографии в реализации **кристаллов**. Напомним, что существование пространственной группы определяет **возможность** кристаллического упорядочения, но еще **не гарантирует**, что соответствующий реальный кристалл будет обязательно **существовать** при данных физических условиях (поскольку какие-то иные факторы могут этому препятствовать).

Данная концепция лежит в основе каждого из подходов, описанных выше, хотя имеются и нерешенные вопросы; например, вопрос о том, каким способом (адекватно) отобразить **произвольную** дискретную некристаллическую структуру или реальную цепь. К нерешенным вопросам относятся также **количественные** оценки при отражении конкретных структур. В частности, теорема [175, p.99], использующаяся для обоснования политопного подхода, справедлива для адекватного отображения только линии, а также той области, которая находится от нее в непосредственной близости, с точностью до бесконечно малых первого порядка. Линейные молекулярные структуры конкретного (избранного) химического строения, которые уже рассмотрены в литературе, отражены адекватно лишь в пределах ближнего порядка от избранного атома: с увеличением размера отображения вдоль по цепи возникало и нарастало напряжение, которое в итоге вызывало дефекты в материалах. При этом строгие ограничения на протяженность адекватно отображаемых структур (цепей) в литературе не указаны.

2.1.4. Определение проблемы

В настоящей работе изучаются симметрийные свойства линейных цепей, образованных только одинаковыми правильными тетраэдрами, объединенными по торцевым

граням. Выпрямленная “конформация” такой цепи представлена на рис. 2.1; вариант такой бесконечной цепи известен как спираль Бердийка-Коксетера. Значительный интерес представляет не только эта цепь, но и другие линейные цепи из тетраэдров. Кроме того, тетраэдрические кластеры с высокой некристаллографической симметрией (например, 11-вершинные) часто встречаются, в изолированном виде или в качестве фрагментов непрерывных сеток, в разных экспериментально изученных кристаллических структурах [79]. Разницу в длинах ребер тетраэдров в таких реальных кластерах (которая не превышает 5%, см., напр., кластеры в работе [186]) можно считать физически допустимой, и аппроксимировать тетраэдры в таких кластерах правильными тетраэдрами. Следует упомянуть также некоторые интерметаллиды: например, в работе [187] обсуждаются наиболее симметричные упаковки тетраэдрических кластеров, - упаковки, в которых тетраэдры образуют икосаэдры; иными словами, рассматриваются тетраэдры также с разницей в длинах ребер $\sim 5\%$, т.к. известно, что ребро икосаэдра l по длине примерно на 5% больше, чем расстояние от его центра до вершин ($\sim 0.951 \cdot l$).

При изучении симметрии структур в E^3 , которые можно аппроксимировать линейными цепями одинаковых правильных тетраэдров, объединяемых по граням, мы ведем поиск вариантов, которые могут обладать максимально возможной некристаллографической симметрией. Прототипы с большим числом преобразований некристаллографической симметрии имеются в разбиениях на тетраэдры неевклидовых (римановых) пространств той же или более высокой размерности [16, 141, 185]. Поскольку тетраэдры изучаемых в E^3 структур являются одинаковыми и правильными, то рассмотрены должны быть регулярные тетраэдрические разбиения римановых пространств лишь *постоянной* кривизны; в первую очередь это разбиения сферы S^3 (постоянной положительной кривизны) и пространства H^3 (постоянной отрицательной кривизны).

Группа симметрии политопа $\{3,3,5\}$, вершины которого принадлежат сфере S^3 в пространстве E^4 – это группа отражений. Пространство E^4 является одним из двух взаимно-перпендикулярных 4-мерных подпространств, определяющих 8-мерное пространство E^8 [188]. Максимальная группа отражений, в которую группа симметрии политопа $\{3,3,5\}$ может быть вложена, - это группа симметрии 8-мерной решетки E_8 [16]. Поэтому для выявления симметрий цепей правильных тетраэдров, объединенных по граням, достаточно использовать симметрии пространств размерности не выше 8.

2.1.5. Основные результаты

Для описания симметрийных свойств тетраэдрических цепей нами использован синтез цитированных выше подходов. В настоящей главе:

- 1) сформулированы такие требования к отображению тетраэдрических цепей из пространств S^3 , H^3 в пространство E^3 , которые дают возможность сохранить симметрийные свойства “идеальных прототипов” (обладающих максимально возможной высокой симметрией) и обеспечить в этом отношении *адекватность* отображения;
- 2) выявлена величина максимального **протяжения** фрагмента цепи, который отображается адекватно, т.е. строго установлено искомое **количественное ограничение** на величину базовой симметрийной структурной единицы;
- 3) выявлена **полная** группа симметрии базовой симметрийной структурной единицы;
- 4) представлено теоретико-групповое описание симметрии цепей, полученных сборкой базовых симметрийных структурных единиц.

Полученные в настоящей работе результаты дали возможность

- описать варианты тетраэдрических цепей, которые формируются по единому закону и обладают высокой (максимально возможной) некристаллографической симметрией; предложить соотношение связи между группой симметрии решетки E_8 и группами симметрии, изоморфными группам симметрии таких цепей;
- показать, что охватывающей конструкцией для описания симметрии тетраэдрических структур является решетка E_8 , являющаяся плотнейшей 8-мерной высокосимметричной кристаллографической решеткой (ее группа симметрии содержит $2^{14} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7 = 696729600$ элементов [16]);
- выделить среди тетраэдрических цепей класс спиралей, полученных объединением по торцевым граням (по единому закону) базовых симметрийных структурных единиц; эти спирали обладают некристаллографической (скрытой) симметрией.

2.1.6. Структура главы

Оставшаяся часть этой главы построена следующим образом. Сначала (раздел 2) мы описываем возможные тетраэдрические разбиения 3-мерных пространств постоянной положительной (S^3) и отрицательной (H^3) кривизны; затем мы выделяем базовую симметрийную структурную единицу. Эта единица представляет собой фрагмент линейной цепи одинаковых правильных тетраэдров, объединенных по граням, который содержит

наибольшее число тетраэдров, позволяющее ему в любой конфигурации еще сохранять свои топологические свойства (т.е. количество тетраэдров и вершин) при отображении из пространств S^3 и H^3 в E^3 . Мы показываем, что фрагмент с такими свойствами содержит 4 тетраэдра (поэтому назван *тетраблоком*) и реализуется в трех вариантах: двух энантиоморфных (правом и левом линейном) и одном неэнантиоморфном (плоском). Тетраблок содержит 7 вершин и 10 треугольных граней, и в каждом из трех вариантов тетраблока имеется четыре неэквивалентных типа вершин. В энантиоморфных вариантах тетраблока в одной вершине сходятся 6 ребер, и еще в трех парах вершин по 5, по 4 и по 3 ребра. В неэнантиоморфном варианте в двух вершинах сходятся по 6 ребер, в двух других вершинах - по 3 ребра, в двух вершинах с проходящей через них плоскостью симметрии – по 4 ребра, и в одной вершине с проходящими через нее двумя плоскостями симметрии сходятся 4 ребра.

Симметрийные свойства тетраблока ранее описаны не были. Для того чтобы всесторонне объяснить и описать эти свойства, приходится использовать такие взаимно дополняющие математические объекты с изученными свойствами из разных областей или ветвей математики, которые обладают теми же топологическими характеристиками (т.е. допускают такую же геометрическую интерпретацию). Поэтому в разделе 2.3 мы обсуждаем некоторые комбинаторные конструкции, относящиеся к так называемым t -(v, k, λ)-схемам [16, с.118]. Мы показываем, каким образом некристаллографическая симметрия этих объектов в пространстве E^3 связана с симметрией (a) правильного тетраэдра и (б) разбиения тора на 14 правильных криволинейных треугольников, содержащего 7 вершин (7-вершинной регулярной триангуляции тора). В разделе 2.4 обсуждается одна из 7-вершинных нерегулярных триангуляций сферы и ее связь с линейным объединением 4-х тетраэдров, имеющим общие грани (тетраблоком). Реализация 7-вершинной регулярной триангуляции тора в виде многогранника ("многогранника Часара") и ее связь с тетраблоком обсуждается в разделе 2.5. Мы показываем, что энантиоморфный вариант тетраблока соответствует 7-вершинному нерегулярному разбиению сферы на треугольники; последнее может быть получено из 7-вершинного регулярного разбиения тора на 14 треугольников (являющегося геометрической реализацией 2-(7,3,1)-схемы). Группа симметрии 7-вершинного регулярного разбиения тора – это проективная специальная линейная группа $PSL(2,7)$ порядка $168 = 2^3 \cdot 3 \cdot 7$.

Раздел 2.6 представляет теоретико-групповое описание симметрии тетраблока. Все 7 вершин (точек) как в регулярной триангуляции тора, так и в 2-(7,3,1)-схеме эквивалентны друг другу, в отличие от тетраблока, в котором они неэквивалентны. Для выявления группы симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока мы проводим разложение группы

$PSL(2,7)$ на 7 смежных классов, отвечающих 7 вершинам регулярной триангуляции тора (1 этап), а затем переходим к разложению группы $PSL(2,7)$ на 4 двойных смежных класса в соответствии с указанными выше 4 неэквивалентными типами вершин тетраблока (2 этап). Необходимую сортировку элементов группы $PSL(2,7)$ можно осуществить наиболее адекватным образом, используя геометрическую интерпретацию некоторой триангулированной системы с той же группой симметрии, количество треугольников которой кратно 14, и среди них есть 14 треугольников, соответствующих регулярной триангуляции тора.

Квартика Клейна [189] представляет собой именно такую триангулированную структуру: это регулярное разбиение части гиперболической плоскости, которое содержит 24 вершины и 56 треугольников. Этого разбиения достаточно для осуществления требуемой сортировки. Более удобно, однако, использовать разбиение, *дуальное* квартике Клейна; оно отображается на себя также группой $PSL(2,7)$, но образовано 56 центрами треугольников квартики Клейна. На 1-м этапе сортировки мы используем тот факт, что эти 56 центров (вершин) могут быть разбиты на 7 эквивалентных подмножеств по 8 вершин. Каждое из подмножеств геометрически представляет собой куб, а кубы отображаются друг в друга циклической подгруппой C_7 группы $PSL(2,7)$. На 2-м этапе мы проводим пересортировку этих кубов по инвариантности относительно подгруппы C_2 группы $PSL(2,7)$, которая соответствует оси симметрии 2-го порядка энантиоморфного варианта тетраблока; подобная пересортировка относительно любой подгруппы всякой группы может быть осуществлена всегда. Пересортировка позволяет разбить 7 кубов на 4 совокупности: один куб, который инвариантен относительно C_2 , и еще три пары кубов. Каждая пара инвариантна относительно C_2 . Далее, мы установили (в рамках подхода так называемой “цветной симметрии”), что группой симметрии каждого из энантиоморфных вариантов тетраблока является группа, изоморфная группе $PSL(2,7)$, в которой все преобразования, кроме поворота на 180° (оси C_2), являются нежесткими.

Затем мы показываем, что взаимные трансформации всех трех вариантов тетраблока можно осуществить с помощью переброски $F_{i \rightarrow j}$ диагоналей в “ромбах”, образованных двумя соседними треугольными гранями объединения тетраэдров [79]; это локальное элементарное топологическое преобразование (обмен соседями) [190] или изомеризация многогранника [191]. Правый линейный вариант тетраблока может быть преобразован в левый линейный, оба линейных (правый и левый) – в плоский. Преобразование $F_{i \rightarrow j} \cdot F_{j \rightarrow i} = 1$, т.е. F – это (нежесткое) преобразование 2-го порядка: $F_{j \rightarrow i} = (F_{i \rightarrow j})^{-1}$. Это свидетельствует о том, что в группах симметрии *всех трех* вариантов тетраблока имеется подгруппа, изоморфная группе $PSL(2,7)$; для обоих энантиоморфных вариантов она совпадает с группой $PSL(2,7)$. Плоский

вариант тетраблока – промежуточный между правым и левым вариантами, поэтому его группа симметрии должна содержать также преобразование 2-го порядка (не принадлежащее группе $PSL(2,7)$), отображающее правый и левый варианты тетраблока друг в друга. Это имеет место для группы, содержащей группу $PSL(2,7)$ в качестве подгруппы индекса 2. Дальнейшее рассмотрение показало, что группой симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока является группа “цветной симметрии”, которая изоморфна проективной общей линейной группе $PGL(2,7)$ порядка $336 = 2^4 \cdot 3 \cdot 7$.

Раздел 2.7 представляет теоретико-групповое описание симметрии цепей, полученных сборкой тетраблоков. Симметрия замкнутой спирали из тетраблоков определяется произведением циклической группы и группы симметрии тетраблока. Хотя тетраблок – это часть политопа $\{3,3,5\}$, но группа симметрии политопа (порядка $2^6 \cdot 3^2 \cdot 5^2$) не содержит подгруппу порядка $2^3 \cdot 3 \cdot 7$, отображающую симметрию тетраблока. Поэтому только использование конструкции, охватывающей эти группы, т.е. группы Вейля $W(E_8)$ решетки E_8 порядка $2^{14} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7$ [192, р.85], позволило нам определить симметрии замкнутых спиралей из тетраблоков как в 4-мерном политопе $\{3,3,5\}$, так и в координационной сфере 8-мерной решетки E_8 . Затем в разделе 2.7 рассмотрены три примера незамкнутых спиралей с разными углами вращения, образованных из линейных тетраблоков одинаковой хиральности, объединенных по торцевым граням, и соответствующие примеры реальных цепных структур. В разделе 2.8 описан алгоритм расширения группы $PSL(2,7)$ до группы $PGL(2,7)$. Выводы представлены в разделе 2.9.

2.2. Базовая симметрийная структурная единица цепи правильных тетраэдров и регулярные тетраэдрические разбиения пространств S^3 и H^3

Для дальнейших исследований потребуются некоторые сведения из теории графов [29]. Триангуляция некоторой поверхности называется регулярной, если в каждой ее вершине сходится одинаковое количество треугольников. Если триангуляция некоторой поверхности характеризуется максимально возможной симметрией, то она является не только регулярной, но эквивалентной треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода g ”, т.е. в сферу с g “ручками” [29]. Полным графиком для v точек называется набор v точек, в котором каждая пара точек соединена ребром. Это оказывается возможным только в случае, если количество v вершин равно $v = 0, 3, 4$ или $7 \pmod{12}$ на сфере с $g = (v-3) \cdot (v-4)/12$ ручками, т.е. если число v обладает тем свойством, что $(v-3) \cdot (v-4)$ делится на 12 [29, с.105]. Другими словами, это возможно, только если v равно одному из следующих чисел: 3, 4, 7, 12, 15, 16, 19, ... В частности, вершины правильного тетраэдра ($v = 4$) принадлежат регулярному разбиению сферы ($g = 0$) на треугольники.

2.2.1. Базовая симметрийная структурная единица: определение

В цепи в пространстве E^3 , образованной линейными объединениями по граням правильных тетраэдров, можно выделить такие фрагменты, в которых число тетраэдров, а также вершин не меняется при отображении фрагментов (в любой “конформации”) в регулярные тетраэдрические разбиения пространств S^3 и/или H^3 , т.е. сохраняются симметрийные свойства фрагментов.

Определение. **Базовой симметрийной структурной единицей** цепи тетраэдров будем называть тот из указанных выше фрагментов, количество тетраэдров в котором при этом отображении максимально возможно, а количество вершин v таково, что существует триангулированная поверхность с числом вершин v , соответствующая треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода g ” [29].

Можно ожидать, что тетраэдрические цепи в E^3 , образующиеся с использованием базовой структурной симметрийной единицы, будут обладать некристаллографической симметрией.

2.2.2. Регулярные тетраэдрические разбиения пространства S^3 и тетраблок

Рассмотрим сначала случай пространства постоянной положительной кривизны S^3 , разделенного на идеальные тетраэдры. Строго говоря, в пространстве S^3 существуют три варианта идеальных тетраэдрических многогранника: политоп $\{3,3,3\}$, политоп $\{3,3,4\}$ и политоп $\{3,3,5\}$ [24, , p.292, Table I(ii)]. Они содержат 5, 16 и 600 идеальных тетраэдров, соответственно. У каждого ребра в политопе $\{3,3,3\}$ плотно упакованы 3 тетраэдра - этот фрагмент содержит 5 вершин; в политопе $\{3,3,4\}$ у каждого ребра сходится 4 тетраэдра, во фрагменте 6 вершин; в политопе $\{3,3,5\}$ - 5 тетраэдров, этот фрагмент содержит 7 вершин [24]. Однако отобразить фрагмент из 3 тетраэдров, расположенных у общего ребра в политопе $\{3,3,3\}$, без изменения числа вершин в пространство E^3 невозможно, т.к. этот фрагмент в E^3 содержит 6 вершин вместо пяти. Аналогично, невозможно адекватно отобразить в пространство E^3 обсуждаемые максимально плотные 6-вершинный (4 тетраэдра) и 7-вершинный (5 тетраэдров) фрагменты из политопов $\{3,3,4\}$ и $\{3,3,5\}$, соответственно, т.к. в E^3 они становятся, соответственно, 7- и 8-вершинными фрагментами, хотя число тетраэдров (4 и 5, соответственно) в этих фрагментах не меняется.

Итак, фрагментами, содержащими максимально возможное число объединенных по граням правильных тетраэдров и отображаемыми из S^3 в E^3 с сохранением числа тетраэдров и вершин, являются: фрагмент, содержащий 2 тетраэдра из политопа $\{3,3,3\}$, фрагмент из 3-х тетраэдров из политопа $\{3,3,4\}$, и фрагмент из 4-х тетраэдров из политопа $\{3,3,5\}$. Для

того чтобы выделить базовую симметрийную структурную единицу тетраэдрической цепи для пространств S^3 и E^3 , нужно среди этих фрагментов найти тот, для которого существует триангулированная поверхность (с тем же числом вершин), обладающая наиболее высокой возможной симметрией. Искомый результат можно получить с помощью теории графов [29].

Объединения 2-х и 3-х правильных тетраэдров по граням в E^3 имеют 5 и 6 вершин, соответственно, но триангуляции поверхностей с количеством вершин $v = 5, 6$ обладать наибольшей симметрией не могут, так как существует требование $v \equiv 0, 3, 4 \pmod{12}$ [29, с.105]. Линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров в E^3 имеет 7 вершин, и это количество v допускает возможность наиболее симметричной триангуляции поверхности.

Следовательно, из регулярных тетраэдрических разбиений пространства S^3 следует использовать лишь результат для политопа $\{3,3,5\}$: искомой **базовой симметрийной структурной единицей** цепи тетраэдров для пространств S^3 и E^3 является только семивершинное линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров.

Оно содержит наибольшее из возможных количество тетраэдров, которые отображаются из политопа $\{3,3,5\}$ в E^3 с сохранением числа $v = 7$ вершин, и для $v = 7$ существует триангулированная поверхность, соответствующая треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода g ” [29], т.е. обладающая максимально-возможной симметрией. Это объединение 4-х тетраэдров будем называть **тетраблоком**.

Очевидно, тетраблок может реализоваться в трех “конформационных” вариантах: двух энантиоморфных (правом и левом) и одном неэнантиоморфном (плоском), рис.2.2, в то время как два и/или три объединенных по граням тетраэдра образуют только один вариант. Правый и левый энантиоморфные варианты имеют ось симметрии 2-го порядка C_2 (эта ось проходит через вершину 3 и середину ребра 6-7, рис.2.2 a ; через вершину 7 и середину ребра 3-6, рис.2.2 b), а плоский неэнантиоморфный вариант – две взимно перпендикулярные плоскости симметрии (проходящие через вершины 4-2-6-1-5 и 3-6-7, рис.2.2 c), а также ось симметрии 2-го порядка по линии пересечения этих плоскостей (через вершину 6 и середину ребра 3-7, рис.2.2 d). Диаграммы Шлегеля для тетраблока представлены на рис.2.2 e , 2.2 d , 2.2 e .

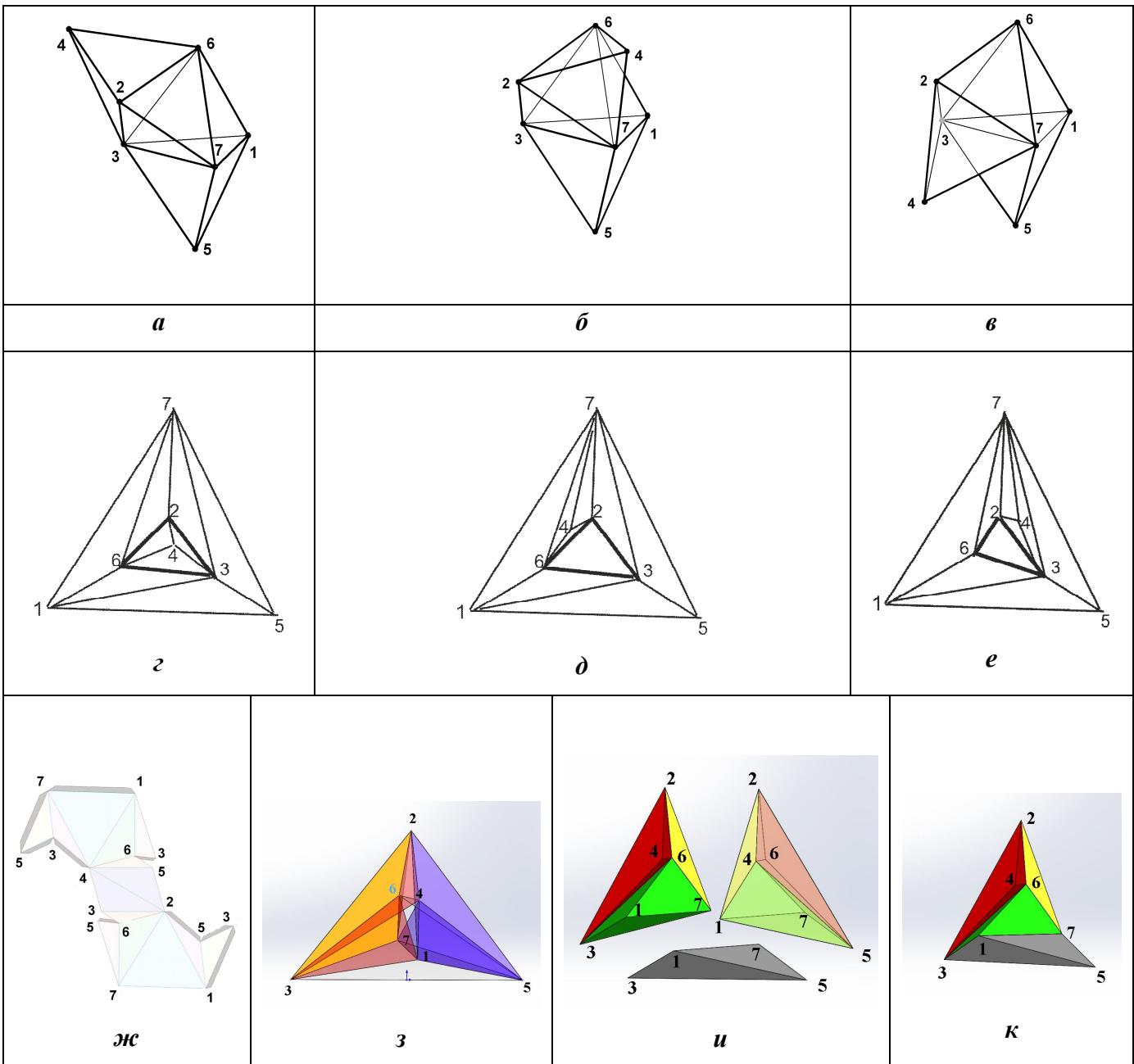


Рис.2.2. Тетраблок ((*a*), (*б*), (*в*)) - семивершинное линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров. Это универсальная базовая симметрийная структурная единица тетраэдрических цепей в пространствах постоянной кривизны; может реализоваться в трех “конформационных” вариантах: энантиоморфные правый (*a*) и левый (*б*) варианты; неэнантиоморфный (плоский (*в*)) вариант; для упрощения идентификации вариантов тетраблока вершинам присвоены условные номера.

Диаграммы Шлегеля - проекции тетраблока на грань 1-7-5, сохраняющие его топологию (количество вершин, ребер и граней): (*жс*) – для варианта тетраблока (*a*), (*з*) – для варианта тетраблока (*б*), (*и*, *к*) – для варианта тетраблока (*в*).

Реализация 7-вершинной регулярной триангуляции тора в виде многогранника Часара [193]: (*жс*) - развертка многогранника - адаптировано из [194], (*з*) - результат склейки развертки (*жс*) в объединение 7 неравнореберных тетраэдров, образующих многогранник Часара, (*и*) – раздельное представление 7 тетраэдров многогранника Часара, (*к*) - объединение 4 тетраэдров из многогранника Часара – раздел 2.5.

2.2.3. Регулярные тетраэдрические разбиения пространства H^3 и тетраблок

Рассмотрим теперь случай пространства постоянной отрицательной кривизны (H^3), разделенного (мощёного) идеальными тетраэдрами, - это гиперболические соты $\{3,3,6\}$; в них у каждого ребра сходятся 6 идеальных гиперболических тетраэдров [195, 196]. Существуют 8 универсальных регулярных разбиений многообразий (множеств) в пространстве H^3 , имеющих **конечный объем**; они содержат 10, 28, 54, 120, 182, 570, 640, 672 гиперболических тетраэдров (см. таблицу 1 в работе [196]), и шесть идеальных гиперболических тетраэдров расположены у общего ребра в каждом из этих разбиений. Поэтому можно обсуждать отображение гиперболических тетраэдров такого разбиения из H^3 в E^3 .

Следует выявить базовую симметрийную структурную единицу цепи тетраэдров для H^3 и E^3 . Содержать больше пяти тетраэдров подобная единица не может в силу невозможности объединить без самопересечений 6 (и более) правильных тетраэдров у одного общего ребра в пространстве E^3 . С другой стороны, объединение пяти правильных тетраэдров по граням тоже не подходит, так как в E^3 оно содержит 8 вершин, а триангуляция поверхности с количеством вершин $v = 8$ не может обладать наибольшей симметрией [29, с.105]. Поэтому, как и в случае S^3 и E^3 , для пространств H^3 и E^3 следует избрать только семивершинное линейное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров, тетраблок. В итоге тетраблок обретает смысл **универсальной** базовой симметрийной структурной единицы тетраэдрических цепей (в любой “конформации”) в пространствах постоянной кривизны.

Некоторые аспекты обсуждаемых вопросов в литературе упоминались. В частности, в работах [197, 198] отмечено существование фрагментов из 4-х тетраэдров, объединенных по граням (“тетраэдрических единиц”, [198]), и любая цепь из тетраэдров строилась в работе [198] последовательным совмещением друг с другом 3-х тетраэдров этих тетраэдрических единиц. Однако, задача отыскания какой-либо базовой совокупности тетраэдров для пространств E^3 , S^3 и H^3 в работах [197, 198] не ставилась. Семивершинное объединение по граням 4-х тетраэдров было введено в работах [78, 84]; были также рассмотрены некоторые вопросы, связанные с его симметрией [84].

2.3. Комбинаторные конструкции и некристаллографическая симметрия

Найдем топологические характеристики тетраблока, которые в дальнейшем будут использованы для выявления группы его симметрии. Для этого сначала рассмотрим

комбинаторную конструкцию, которая может наиболее полно отображать симметрию правильного тетраэдра и линейных объединений по граням правильных тетраэдров.

2.3.1. Комбинаторная структура правильного тетраэдра: 2-(4,3,2)-схема

Совокупность 1, 2, 3, 4 четырех вершин тетраэдра 1234 (номера внутри белых кружков на рис.2.3 α) разбивается на четыре тройки чисел (грани) 123, 134, 124, 234 таким образом, что любая пара вершин (т.е. ребро) принадлежит только 2-м тройкам (т.е. граням). Комбинаторную структуру правильного тетраэдра можно рассматривать как частный случай t -(v,k,λ)-схемы [16, с.118]. А именно, пусть X есть v -множество (т.е. множество из v элементов), элементы которого мы называем точками; t -(v,k,λ)-схема - это набор (совокупность) различных k -подмножеств (называемых *блоками*) множества X , такой, что любое t -подмножество из множества X содержится в точности в λ блоках. Для тетраэдра множество X содержит $v=4$ элемента (4 точки, являющиеся вершинами тетраэдра), а t -(v,k,λ)-схема – это 2-(4,3,2)-схема: эти 4 элемента входят в совокупность разных подмножеств из $k=3$ элементов (трех вершин, образующих *блок*, т.е. грань) так, что любое подмножество из $t=2$ элементов (двух вершин, образующих ребро) содержится в точности в $\lambda=2$ блоках (т.е. принадлежит строго двум граням). Параметры v и k в данном случае удовлетворяют условию $v = 1 + k(k-1)/2$ [16, с.118]. Симметрия каждой комбинаторной конструкции отображается таблицей инцидентности (ТИ), в ней указаны элементы, принадлежащие каждому блоку.

Если каждой тройке чисел (грани) присвоить номер 1, 2, 3 или 4 (номера внутри черных кружков над гранями на рис.2.3 α), то ТИ для тетраэдра можно представить таблицей 4x4 на рис.2.3 β . Она состоит из клеток, заполненных серыми кружками, которые являются знаками инцидентности (принадлежности), и пустых клеток. Номера столбцов $j = 1, 2, 3, 4$ в белых кружках – это номера вершин, а номера строк $i = 1, 2, 3, 4$ в черных кружках – номера граней тетраэдра (рис.2.3 β). Если вершина j принадлежит грани i тетраэдра, то в клетке на пересечении строки i и столбца j в этой таблице имеется серый кружок, тогда как пустая клетка указывает на отсутствие инцидентности. По этой таблице видно, например, что вершина 1 принадлежит граням 2, 3 и 4 (в столбце 1 есть три серых кружка: в строках 2, 3 и 4). Любые две строки содержат 2 знака инцидентности, принадлежащие двум общим столбцам (т.е. две любые грани в пересечении содержат две вершины - ребро) и наоборот, рис.2.3 β . Любые три строки содержат один знак инцидентности, принадлежащий одному общему столбцу, поскольку каждая вершина принадлежит трем граням. ТИ допускает перестановку любых двух столбцов между собой и/или двух строк между собой (вместе со знаками инцидентности) [21, с.12]: эти перестановки оставляют тетраэдр инвариантным и

потому являются элементами его группы симметрии (группы вращений порядка 12); все 12 возможных ТИ являются, по существу, 12 различными формами (реализациями) одной и той же комбинаторной структуры (блок-схемы).

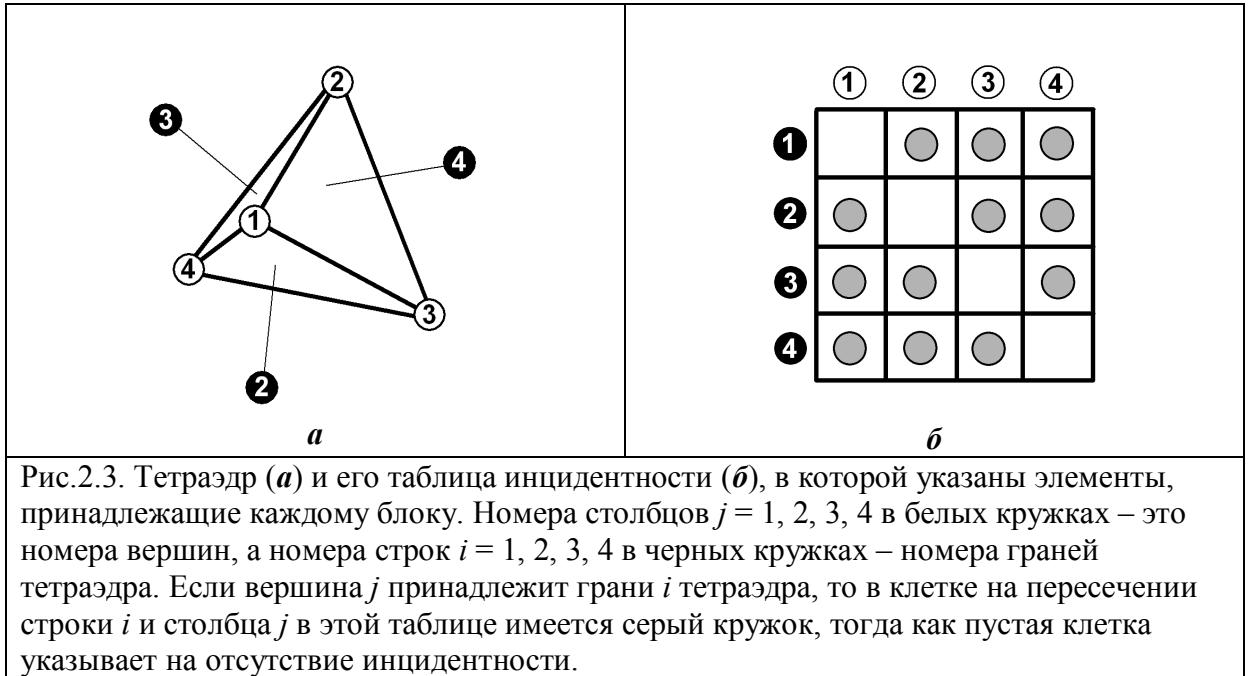


Рис.2.3. Тетраэдр (*a*) и его таблица инцидентности (*б*), в которой указаны элементы, принадлежащие каждому блоку. Номера столбцов $j = 1, 2, 3, 4$ в белых кружках – это номера вершин, а номера строк $i = 1, 2, 3, 4$ в черных кружках – номера граней тетраэдра. Если вершина j принадлежит грани i тетраэдра, то в клетке на пересечении строки i и столбца j в этой таблице имеется серый кружок, тогда как пустая клетка указывает на отсутствие инцидентности.

2.3.2. Свойства 2-(7,4,2)-схемы

В силу того, что тетраэдр определяется 2-(4,3,2)-схемой, для цели настоящей работы потенциально важными могут быть и другие 2- $(v,k,2)$ -схемы, поскольку они могут отвечать многогранникам. Вершины правильного тетраэдра ($v = 4$) принадлежат регулярному разбиению сферы на треугольники. Как отмечалось выше, в общем случае наиболее симметрическая (регулярная) триангуляция некоторой поверхности эквивалентна треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность рода g ” (т.е. в сферу с g “ручками”) [29], и возможно это лишь для следующего количества v вершин: $v = 0, 3, 4$ или $7 \pmod{12}$ [29, с.105]. Учитывая соотношение $v = 1 + k(k-1)/2$, рассматриваемые 2- $(v,k,2)$ -схемы могут быть реализованы, только если $v = 4, 7, 11, \dots$. Совпадение по количеству v вершин (хотя и не по форме граней) с условием $v = 0, 3, 4$ или $7 \pmod{12}$ для регулярной триангуляции некоторой поверхности имеется лишь при $v = 4$ и $v = 7$. Осуществить при $v = 7$ регулярную триангуляцию поверхности можно в единственном случае [29, с.105]: если эта поверхность - тор (т.е. сфера с одной “ручкой”, $g = 1$); это разбиение содержит 14 треугольников, 21 ребро.

При $v = 4$ рассматриваемая схема определяет тетраэдр; обсудим вариант при $v = 7$, т.е. блок-схему 2-(7,4,2). ТИ для блок-схемы 2-(7,4,2) может быть представлена в виде, изображенном на рис.2.4 a . Группой симметрии 2-(7,4,2)-схемы является проективная специальная линейная группа $PSL(2,7)$ [192, 199] порядка $2^3 \cdot 3 \cdot 7 = 168$. Однако “треугольной” геометрической интерпретации для схемы 2-(7,4,2) нет, поскольку блок состоит из четырех, а не трех элементов (точек). Возникает вопрос о том, существуют ли варианты, обладающие той же группой симметрии, но более подходящей геометрической интерпретацией. Известно, что группа симметрии любой ТИ не меняется, если осуществить в ТИ одновременно взаимную замену всех пустых клеток на клетки с серыми кружками, и клетки с серыми кружками на пустые клетки (итоговая ТИ называется “комплементарной”, дополнительной по отношению к исходной). Действительно, общее количество перестановок любых пар столбцов и/или строк ТИ, которые оставляют итоговую систему инвариантной, совпадает с количеством таких перестановок в ТИ исходной системы. Всего существует 168 реализаций ТИ одной и той же блок-схемы 2-(7,4,2), которые образуют группу $PSL(2,7)$.

2.3.3. Регулярная 7-вершинная триангуляция тора и 2-(7,3,1)-схема

Комплементарной ТИ для блок-схемы 2-(7,4,2) является ТИ блок-схема 2-(7,3,1); она приведена на рис.2.4 b . Видно, что она действительно является более подходящей, поскольку имеет “треугольную” интерпретацию. А именно, это множество семи чисел 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, разбитое на семь *троек* чисел 234, 125, 136, 147, 267, 357, 456 таким образом, что любая пара чисел (т.е. ребро), например, 2-4, 1-5, 4-7 и т.п. принадлежит только одной тройке (т.е. грани).

Геометрической интерпретацией блок-схемы 2-(7,3,1) является 7-вершинная регулярная триангуляция тора [200]. Это разбиение состоит из 14 треугольников, образованных 21 криволинейными ребрами (отрезками геодезических линий) одинаковой длины, и в каждой из 7 вершин сходится 6 ребер. Эта интерпретация является единственной, - так же, как единственной поверхностью, для которой возможно осуществить 7-вершинную регулярную триангуляцию, является тор [29, с.105]. Отметим, что существуют два энантиоморфных варианта (правый и левый) этой триангуляции [201], см. также [196]. Правый вариант двухмерной развертки регулярно триангулированного тора представлен на рис.2.5 a , левый - на рис.2.5 b . Оба варианта отвечают таблице инцидентности блок-схемы 2-(7,3,1), приведенной на рис.2.4 b . Отметим также, что из 14 треугольников разверток на рис.5 номерами в черных кружках отмечены и включены в ТИ на рис.2.4 b только 7 (они указаны в строках; их номера - в черных кружках), но они охватывают все вершины и ребра триангуляции. Поэтому структура ТИ на рис.2.4 b несколько отличается от структуры ТИ на

рис.2.3 δ . В отличие от ТИ рис.2.3 δ , любые две строки в ТИ на рис.2.4 δ не содержат два знака инцидентности, принадлежащих 2-м общим столбцам: хотя каждые два смежных треугольника развертки и содержат две общие вершины (ребро), но из этих двух треугольников учтен в ТИ на рис.4 δ только один. Для каждого столбца ТИ на рис.2.4 δ существуют три строки, которые содержат 1 знак инцидентности, принадлежащий этому столбцу, поскольку каждая вершина принадлежит трем треугольникам, включенными в ТИ на рис.2.4 δ (т.е. принадлежит шести треугольникам развертки рис.2.5).

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦
①	●				●	●	●
②			●	●		●	●
③		●		●	●		●
④		●	●		●	●	
⑤	●		●	●	●		
⑥	●	●		●		●	
⑦	●	●	●				●

a

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦
①		●	●	●			
②	●		●			●	
③	●			●			●
④	●				●		●
⑤		●				●	●
⑥			●		●		●
⑦				●	●	●	

б

Рис.2.4. Таблицы инцидентности для двух особых случаев t -(v, k, λ)-схемы.

a - таблица инцидентности блок-схемы 2-(7,4,2). Для множества из $v = 7$ элементов 1, 2, ..., 7 (указанных номерами столбцов 1, 2, ..., 7 в белых кружках) блок-схема 2-(7,4,2) - это набор различных подмножеств из $k = 4$ элементов (строк таблицы с номерами 1, 2, ..., 7 в черных кружках). Любые два столбца ($t = 2$) содержат 2 знака инцидентности, принадлежащие двум общим строкам ($\lambda = 2$). Блок-схема 2-(7,4,2) не имеет “треугольной” геометрической интерпретации, поскольку k -подмножество состоит из 4-х, а не из 3-х элементов (точек).

б - таблица инцидентности блок-схемы 2-(7,3,1), которая является комплементарной по отношению к таблице инцидентности блок-схемы 2-(7,4,2). Для множества из $v = 7$ элементов 1, 2, ..., 7 (указанных номерами столбцов 1, 2, ..., 7 в белых кружках) блок-схема 2-(7,3,1) - это набор различных подмножеств из $k = 3$ элементов (строк таблицы с номерами 1, 2, ..., 7 в черных кружках). Любые два столбца ($t = 2$) содержат 2 знака инцидентности, принадлежащие одной строке ($\lambda = 1$). Для блок-схемы 2-(7,3,1) существует “треугольная” геометрическую интерпретацию (рис.2.5).

Группой симметрии как 2-(7,4,2)-, так и 2-(7,3,1)-схемы является проективная специальная линейная группа $PSL(2,7)$ [199]. Фактически группа $PSL(2,7)$ отображает здесь симметрию 7-вершинной регулярной триангуляции тора.

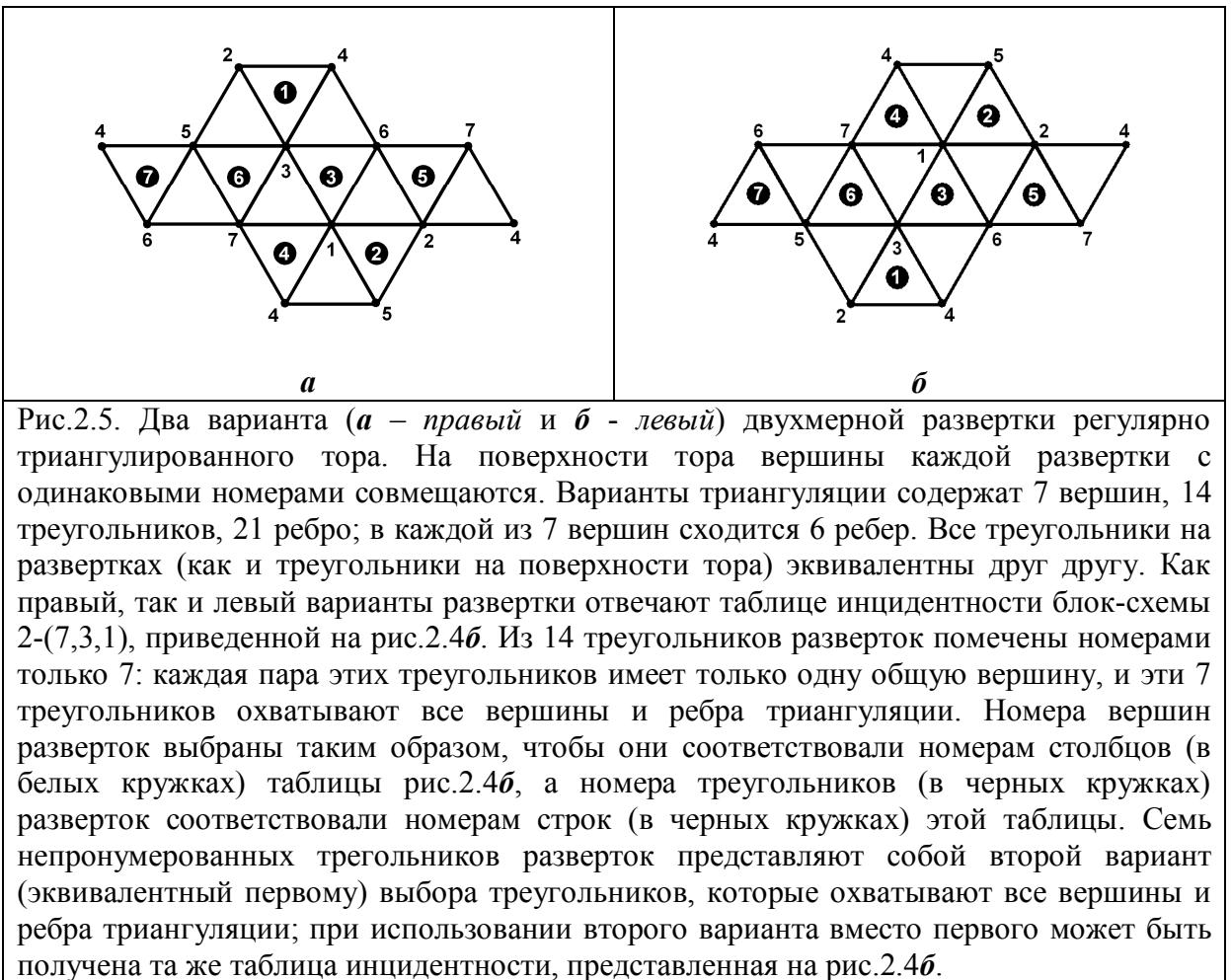


Рис.2.5. Два варианта (*а* – правый и *б* - левый) двухмерной развертки регулярно триангулированного тора. На поверхности тора вершины каждой развертки с одинаковыми номерами совмещаются. Варианты триангуляции содержат 7 вершин, 14 треугольников, 21 ребро; в каждой из 7 вершин сходится 6 ребер. Все треугольники на развертках (как и треугольники на поверхности тора) эквивалентны друг другу. Как правый, так и левый варианты развертки отвечают таблице инцидентности блок-схемы 2-(7,3,1), приведенной на рис.2.4*б*. Из 14 треугольников разверток помечены номерами только 7: каждая пара этих треугольников имеет только одну общую вершину, и эти 7 треугольников охватывают все вершины и ребра триангуляции. Номера вершин разверток выбраны таким образом, чтобы они соответствовали номерам столбцов (в белых кружках) таблицы рис.2.4*б*, а номера треугольников (в черных кружках) разверток соответствовали номерам строк (в черных кружках) этой таблицы. Семь непронумерованных треугольников разверток представляют собой второй вариант (эквивалентный первому) выбора треугольников, которые охватывают все вершины и ребра триангуляции; при использовании второго варианта вместо первого может быть получена та же таблица инцидентности, представленная на рис.2.4*б*.

2.4. Нерегулярная 7-вершинная триангуляция сферы и тетраблок

Необходимо перейти от этой триангуляции тора к некоторой триангулированной структуре в пространстве E^3 , которая может иметь отношение к *линейным* объединениям правильных тетраэдров в E^3 (это объединение всегда является односвязным многообразием [202], т.е. топологически эквивалентным сфере).

Искомая триангулированная (“тетраэдрическая”) структура известна. Согласно [203, р.218], из v -вершинной триангуляции тора можно получить n -вершинную триангуляцию сферы, где $4 \leq n \leq v$. Этот переход можно осуществить от регулярной 7-вершинной триангуляции тора (когда в каждой вершине сходится 6 ребер) к нерегулярной 7-вершинной триангуляции сферы (поскольку регулярная триангуляция с 7 вершинами невозможна для односвязной поверхности [29, с.105]). Далее, согласно [29, с.84, теорема 4.3], для этой 7-вершинной нерегулярной триангуляции сферы существует такой 7-вершинный многогранник, у которого все грани являются треугольниками.

Теорема Эйлера для многогранников, топологически эквивалентных сфере, утверждает, что если v , e и f – это, соответственно, число вершин, ребер и граней такого

многогранника, то имеет место соотношение $v - e + f = 2$. Каждое ребро многогранника, отвечающего триангуляции сферы, принадлежит строго двум его треугольным граням, поэтому $e/3$ - это половина числа треугольников, $f/2$, т.е. $f = 2e/3$. Тогда формула Эйлера принимает вид $v - e + 2e/3 = 2$, и для случая $v = 7$ дает $e = 15$ и $f = 10$. Таким образом, искомый 7-вершинный многогранник содержит 10 треугольных граней и 15 ребер. Можно указать несколько многогранников с треугольными гранями, имеющих такие значения v , e и f . Например: правильный тетраэдр, 3 грани которого объединены с гранями 3-х других тетраэдров, т.е. нелинейное объединение 4-х правильных тетраэдров по граням; октаэдр, одна грань которого объединена с гранью тетраэдра (“одношапочный октаэдр”). Подобные варианты, однако, следует исключить из рассмотрения, поскольку они противоречат исходной задаче: мы пытаемся выявить в E^3 симметрии линейных цепей правильных тетраэдров, объединяемых по граням. Рассматривая только линейные объединения m правильных тетраэдров, легко убедиться в том, что они не могут содержать 7 вершин, 10 граней и 15 ребер, если $m \neq 4$ (действительно, если $m \leq 3$, то количество вершин $v \leq 6$, а если $m \geq 5$, то количество вершин $v \geq 8$). Только линейное объединение по граням 4-х тетраэдров, - тетраблок (в 3-х пространственных вариантах, рис.2.2а, 2.2б, 2.2в) характеризуется строго указанными значениями v , e и f . В итоге 2-(7,3,1)-схема тоже приводит к тетраблоку; таким образом, тетраблок является **единственным** решением, удовлетворяющим всем вышеупомянутым условиям.

2.5. Реализация 7-вершинной регулярной триангуляции тора в виде многогранника и тетраблок

Отметим, что этот вывод, касающийся тетраблока, может быть получен и другим путем. Триангуляция тора может иметь реализацию в пространстве E^3 в виде многогранника; достаточным условием [203, p.220] является существование простой замкнутой траектории через все вершины (петли из ребер) этой триангуляции - такой, что ребро каждого треугольника триангуляции принадлежит этой траектории. В частности, каждая триангуляция тора со степенью вершин, равной 6, содержит траекторию с требуемыми свойствами [203, p.220] (степень вершины – это количество выходящих из нее ребер). Следовательно, каждая триангуляция тора, в которой каждая вершина имеет степень 6, имеет реализацию в пространстве E^3 в виде многогранника. У нас триангуляция тора является минимальной (7 вершин) и в каждой вершине сходится 6 ребер, поэтому существует ее реализация в пространстве E^3 в виде многогранника.

Для случая $v=7$ эта задача была рассмотрена значительно раньше [193], и триангуляция тора была представлена в E^3 в виде “многогранника Császár'a” (Часара), рис.2.2 ж , 2.2 з , 2.2 и ; о более ранних работах см. в [203, p.217-218; 204]. Многогранник Császár'a [193] имеет четыре существенно (визуально) различающихся варианта [204], но в топологическом смысле эти варианты являются изоморфными друг другу [194, 205], поскольку существует лишь один способ изобразить полный граф с 7 вершинами на торе. Многогранник Császár'a является тороидально-подобным многогранником: тороидально-подобным (т.е. в известном смысле *линейным*) объединением по граням 7 тетраэдров с разными длинами ребер треугольных граней, имеет 7 вершин, 21 ребро и 14 граней (как и триангуляция тора). Топологически тор и, следовательно, также многогранник Császár'a, являются сферой с одной “ручкой” [29]. В связи с этим, чтобы преобразовать многогранник Császár'a в структуру, топологически эквивалентную сфере, нужно выделить в нем ручку и затем удалить ее.

Количество вершин, 7, при этом необходимо сохранить. Следовательно, непосредственно на ручке, тоже триангулированной, вершин быть не должно; они могут принадлежать лишь двум (верхнему и нижнему) основаниям ручки, которые сохраняются после ее удаления. Поэтому очевидно, что каждое основание ручки может содержать только один треугольник, а каждая из трех боковых поверхностей триангулированной ручки может содержать только 2 треугольника. При этом одно из ребер каждого из этих шести боковых треугольников является одновременно ребром одного из оснований ручки, а два других ребра каждого треугольника соединяют две вершины одного основания ручки с одной вершиной другого основания. Таким образом, все 6 боковых треугольников являются последовательно смежными и циклически замыкаются (6-й треугольник примыкает к 1-му). В многограннике Császár'a ручку, обладающую перечисленными выше свойствами, образуют любые три последовательных, примыкающих по граням друг к другу, тетраэдра (такое объединение тетраэдров имеет одно общее ребро). При удалении таких 3-х тетраэдров из тороидально-подобного объединения 7 тетраэдров, удаляются 6 ребер и 6 боковых граней, но при этом остаются 4 тетраэдра, а “размыкание” тороидально-подобного многогранника приводит к тому, что 2 треугольных основания ручки становятся внешними треугольными гранями.

В результате удаления ручки в многограннике Császár'a исходные 7 вершин, 21 ребро и 14 граней преобразуются в 7 вершин, 15 ребер и 10 граней цепи из 4-х неправильных тетраэдров, объединенных по граням (рис.2.2 к). Теперь все ребра тетраэдров в цепи можно сделать одинаковыми, что дает объединение 4-х правильных тетраэдров - тетраблок. Следует также учесть, что один из вариантов многогранника Császár'a может быть преобразован в

другой отражением [194], поэтому в этом подходе можно получить два энантиоморфных варианта тетраблока.

2.6. Симметрия тетраблока: теоретико-групповое описание

В данном разделе выявлена группа симметрии тетраблока. Как показано в разделе 3, тетраблок связан с 2-(7,3,1)-схемой и 7-вершинной регулярной триангуляцией тора; их группой симметрии является проективная специальная линейная группа $PSL(2,7)$ [189, 199]. Однако этого недостаточно для выявления группы симметрии тетраблока, поскольку все 7 вершин (точек) как в регулярной триангуляции тора, так и в 2-(7,3,1)-схеме эквивалентны друг другу, тогда как в тетраблоке они неэквивалентны.

2.6.1. Энантиоморфные варианты тетраблока

В одной вершине энантиоморфных вариантов тетраблока сходятся 6 ребер, а в трех парах других – по 5, 4 и 3 ребра (всего 4 неэквивалентных типа вершин). Поэтому для выявления группы симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока следует разложить группу $PSL(2,7)$ на 7 подмножеств (по 24 элемента), отвечающих 7 вершинам регулярной триангуляции тора, а затем - на 4 подмножества в соответствии с указанными выше 4 типами неэквивалентных вершин тетраблока.

2.6.1.1. Квартика Клейна

Надлежащую сортировку элементов группы $PSL(2,7)$ можно осуществить наиболее адекватным образом, используя геометрический образ некоторой триангулированной системы с той же группой симметрии $PSL(2,7)$, количество треугольников которой кратно 14 и содержит в качестве подмножества 14 треугольников регулярной триангуляции тора.

Существует квартика Клейна [185, 189, 196, 199] – триангулированная структура, регулярное разбиение части гиперболической плоскости, содержащее 56 треугольников, 24 вершины, 84 ребра, и 14 треугольников из 56 соответствуют рассмотренной регулярной триангуляции тора; этого разбиения достаточно для осуществления данной сортировки. Для установления группы симметрии тетраблока, имеющего то же количество, 7, вершин, но меньшее количество треугольников, 10, чем в триангулированной развертке тора, 14, более удобно использовать разбиение, *дуальное* квартике Клейна (оно отображается на себя также группой $PSL(2,7)$). Оно образовано 56 центрами треугольников квартики Клейна, рис.2.6, содержит 24 семиугольника (56 вершин, 84 ребра). Эти 56 центров (вершин) могут быть

разбиты на 7 эквивалентных наборов по 8 вершин так, что каждый набор геометрически образует куб [199], и эти кубы отображаются друг в друга циклической подгруппой C_7 группы $PSL(2,7)$.

2.6.1.2. Разбиение вершин квартики Клейна на 7 наборов

Разбиение вершин на 7 наборов можно осуществить, однако, двумя разными способами, и наборы будут отличаться друг от друга [199]. А именно, можно отбирать 8 вершин, переходя от одной к другой, следуя определенному правилу с правыми и левыми поворотами. Если при отборе следовать одному правилу переходов, то 56 вершин будут разбиты на 7 определенных наборов (скажем, *кубов* или *правых кубов*), а если следовать зеркальному правилу переходов, то эти же 56 вершин будут разбиты на 7 других наборов (скажем, *антикубов* или *левых кубов*). Группу $PSL(2,7)$ можно рассматривать как 7O -расширение группы вращений октаэдра O циклической группой 7-го порядка C_7 . Группа $PSL(2,7)$ имеет две несопряженные подгруппы O' и O'' , каждая из которых изоморфна группе вращений октаэдра (куба) O [170]. Поэтому стартовый *правый куб* будет отображаться на себя подгруппой O' , а стартовый *левый куб* - подгруппой O'' . Симметрия квартики Клейна, разбитой на 7 правых кубов, определяется разложением группы $PSL(2,7) \equiv {}^7O$ на смежные классы по подгруппам:

$${}^7O = \bigcup_{i=1}^{56} g_i C_3 = \bigcup_{j=1}^{24} g_j C_7 = C_7 \bigcup_{s=1}^8 g_s C_3 = \bigcup_{m=1}^7 g_m O', \quad (2.5)$$

где $g_s, g_i \notin C_3$, $g_j \notin C_7$, $g_m \notin O'$; \bigcup - знак объединения подмножеств группы. При выборе элементов g_j и g_m , соответственно, только из групп $O' = \bigcup_{j=1}^{24} g_j = \bigcup_{s=1}^8 g_s C_3$ и C_7 , группа 7O может быть представлена произведением своих подгрупп ${}^7O = O' \cdot C_7 = C_7 \cdot O'$. При этом вершины стартового куба (который затем размножается группой C_7) взаимно-однозначно определяются 8 смежными классами $\bigcup_{s=1}^8 g_s C_3$, стартовая вершина этого куба - смежным классом $g_s C_3$, а множество стартовых вершин всех 7 кубов - 7 смежными классами $g_m g_s C_3 = C_7 g_s C_3$, $g_s \notin C_7$. Если заменить в соотношении (2.5) подгруппу O' на подгруппу O'' , то получим разложение группы $PSL(2,7)$, которое соответствует квартике Клейна, разбитой на 7 левых кубов. Числа смежных классов 56, 24, 8, 7 определяются тем, что в квартике Клейна [185, 196] семиугольники сходятся по 3 в каждой из 56 вершин, принадлежащих 7 кубам. При соединении центров всех 24 семиугольников образуются 56 равносторонних

гиперболических треугольников, сходящихся по 7 в каждой из 24 вершин. Каждая из восьми циклических подгрупп C_7 (“осей” C_7) группы 7O сохраняет инвариантной определенную тройку семиугольников.

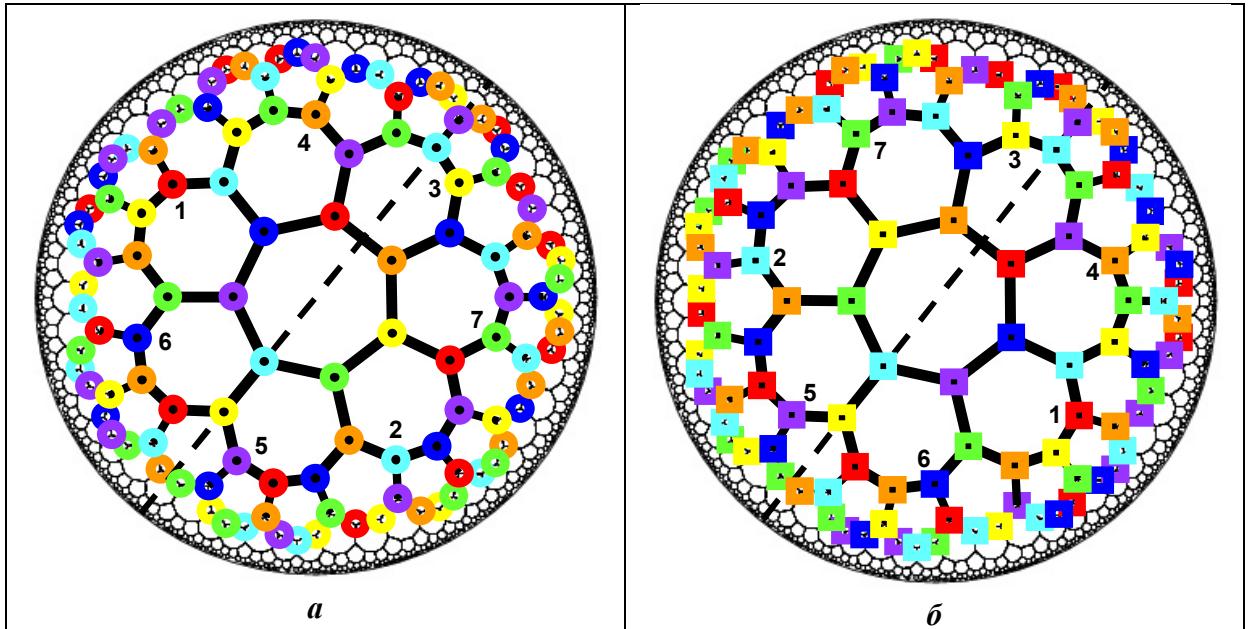


Рис.2.6. Дуальное разбиение квартиki Клейна. Два разных способа разбиения 56 ее вершин на 7 совокупностей по 8 вершин в каждой (поверхность – сфера с тремя “ручками” - получается объединением пар противоположных периферийных вершин одного цвета): 2.6 a – кольца одного цвета указывают совокупности вершин, принадлежащих одному кубу (правому кубу) из 7 возможных; 2.6 b – квадраты одного цвета указывают совокупности вершин, принадлежащих одному “антикубу” (левому кубу) из 7 возможных. Зеркальное отражение относительно пунктирной линии переводит, соответственно, кольца (квадраты) на рис.2.6 a (2.6 b) в квадраты (кольца) того же цвета на рис.2.6 b (2.6 a). Номера вершин, отмеченные на рис.2.6 a (2.6 b), соответствуют номерам вершин на развертках регулярно триангулированного тора на рис.2.5 a (2.5 b) и номерам вершин энантиоморфных вариантов тетраблоков на рис.2.2 a (2.2 b). Рисунок, содержащий обозначения 7 кубов и 7 антикубов вместе, можно найти по ссылке [142].

Обозначим через $T_{2+\zeta}$ правую, а через $T_{2+\bar{\zeta}}$ - левую 7-вершинную триангуляцию тора [185, 196]. Комплексное число ζ традиционно используется [185, 196] для аналитического описания квартики Клейна, $\zeta = (1 + \sqrt{-3})/2$, $\bar{\zeta} = (1 - \sqrt{-3})/2$, $(2 + \zeta)(2 + \bar{\zeta}) = 7$. При вложении в квартику Клейна правого (или левого) 7-вершинного триангулированного тора $T_{2+\zeta}$ (или $T_{2+\bar{\zeta}}$) [189, 199], его вершины (т.е. вершины разверток на рис.2.5 a , 2.5 b) совпадают с множеством 7 стартовых вершин 7 кубов, рассмотренным в соотношении (2.5), - вершин, пронумерованных в семиугольниках рис.2.6 a , 2.6 b . Это множество семи вершин,

эквивалентных друг другу, составляет "правую" ("левую") орбиту подгруппы C_7 группы 7O . В свою очередь, эта орбита из 7 вершин взаимно-однозначно соответствует орбите из 7 правых (левых) кубов; этой орбите из 7 правых (левых) кубов взаимно-однозначно соответствует разложение 7O на смежные классы по подгруппе O' (O'') в соотношении (2.5) и соотношении (2.15) раздела 2.8.

2.6.1.3. Пересортировка вершин квартики Клейна: от 7 наборов к 4 наборам

Тетраблок обладает точечной группой симметрии C_2 (осью 2-го порядка) а его вершины взаимно-однозначно соответствуют вершинам $T_{2+\zeta}$ (или $T_{2+\bar{\zeta}}$), т.е. семи взаимно-эквивалентным вершинам триангуляции тора. Следует произвести пересортировку 7 кубов, соответствующих этим вершинам, по инвариантности относительно подгруппы C_2 . Чтобы удовлетворить этим условиям, симметрия тетраблока должна определяться разложением 7O на двойные смежные классы по подгруппам C_2 и O' (O''). Такое разложение в соотношении (2.5) и соотношении (2.15) раздела 2.8 приводит к разложению 7-вершинной орбиты группы C_7 на 4 орбиты группы C_2 :

$${}^7O = C_7 \cdot O' = \bigcup_{i=1}^7 g_i O' = \bigcup_{k=1}^4 C_2 g_k O' = O' \bigcup C_2 g_2 O' \bigcup C_2 g_3 O' \bigcup C_2 g_4 O' \quad (2.6)$$

и

$${}^7O = C_7 \cdot O'' = \bigcup_{i=1}^7 \tilde{g}_i O'' = \bigcup_{k=1}^4 C_2 \tilde{g}_k O'' = O'' \bigcup C_2 \tilde{g}_2 O'' \bigcup C_2 \tilde{g}_3 O'' \bigcup C_2 \tilde{g}_4 O'', \quad (2.7)$$

где $g_1, \tilde{g}_1 = 1$; $g_2 \neq g_3 \neq g_4$; $\tilde{g}_2 \neq \tilde{g}_3 \neq \tilde{g}_4$; $g_i, \tilde{g}_i \notin C_7$; $g_i, g_k \notin O'$; $\tilde{g}_i, \tilde{g}_k \notin O''$; $g_k, \tilde{g}_k \notin C_2$.

Рассмотрим соотношение (2.6). Согласно определению орбиты группы, каждому элементу орбиты группы 7O однозначно соответствует смежный класс gO' группы 7O , где $g \in O'$, а паре элементов – объединение двух смежных классов $C_2 g O' = g O' \bigcup 2g O'$, где $2 \in C_2$; для соотношения (2.7) следует использовать O'' вместо O' . Это означает, что множество семи эквивалентных элементов разбивается на четыре неэквивалентных подмножества. Они состоят из одного элемента (C_2 является подгруппой O' , $g_1 = 1$, $C_2 \cdot O' = O'$, поэтому в тетраблоке этому элементу будет поставлена в соответствие вершина типа 3, рис.2.2a, через которую проходит ось C_2) и еще трех пар элементов (элементы gO' и $2gO'$ в каждой паре эквивалентны друг другу по группе C_2 , поэтому этим парам элементов будут поставлены в соответствие пары вершин 1-2, 4-5 и 6-7 в тетраблоке, рис.2.2a).

2.6.1.4. Группа симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока

Для того чтобы реализовать это соответствие, следует некоторым образом выделить эти 4 типа вершин. Удобный способ предоставляет аппарат так называемой “цветной симметрии” [206, 207]. Концепция цветной симметрии возникла как обобщение понятия геометрической симметрии. Каждой точке геометрической фигуры присваиваются негеометрические свойства, а именно “цвета” (или наборы цветов), и ставится задача изучения групп симметрии таких цветных объектов. В зависимости от конкретной физической проблемы абстрактное понятие “цвета” может интерпретироваться по-разному [207]. В рассматриваемом случае 4 возможных “цвета” соответствуют 4-м неэквивалентным типам вершин тетраблока, различающимся количеством ребер, сходящихся в этих вершинах. Согласно теории цветной симметрии [206], для любой группы G можно построить группу $(G)^w$ цветной симметрии, которая изоморфна группе G . Соотношение (2.6) (или (2.7)) определяет разложение группы 7O по определенным подгруппам, поэтому для данного разложения можно всегда построить группу $({}^7O')^w$ (или $({}^7O'')^w$) цветной симметрии. Тем самым решена задача выявления группы симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока: это группа $({}^7O')^w$ для правого варианта и $({}^7O'')^w$ – для левого; эти группы изоморфны группе 7O и, соответственно, имеют порядок 168. При этом важно подчеркнуть, что согласно теории цветной симметрии [206] все элементы g группы 7O , кроме элементов группы C_2 , будут заменены элементами gw , где w – нежесткое преобразование, не принадлежащее группе 7O и обеспечивающее переход вершины триангулированного тора в соответствующую вершину тетраблока. Явный вид преобразования w определяется из сопоставления координат вершин тора и тетраблока, и для нашей задачи принципиальной роли не играет. В группе 7O порождающие элементы связаны соотношениями [192, p.3] $(g_2)^2 = (g_3)^3 = (g_2 \cdot g_3)^7 = 1$, тогда как в группе $({}^7O')^w$, которая изоморфна 7O , имеют место соотношения $(g_2 w_2)^2 = (g_3 w_3)^3 = (g_2 w_2 \cdot g_3 w_3)^7 = 1$.

Преобразование σ (“гиперболическое зеркало”, символически показанное пунктиром на рис.2.6), которое определяется соотношением (2.14) раздела 2.8, отображает 7 правых кубов (2.5) в 7 левых кубов (2.15). Существует преобразование, переводящее правый вариант тетраблока (2.6) в левый вариант (2.7): переброска $F_{i \rightarrow j}$ диагонали в “ромбе”, образованном двумя соседними треугольными гранями [79] тетраблока; это локальное элементарное топологическое преобразование (обмен соседями) [190] или изомеризация многогранника [191]. Действительно, если в правом варианте (рис.2.2a) тетраблока a) вершины 1, 3 и 7 циклически перенумеровать, $1 \rightarrow 7, 7 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 1$, вершины 2 и 6 также перенумеровать, $2 \rightarrow 6, 6 \rightarrow 2$; б) ребро 2-1 (бывшее ребром 6-7) удалить, а вершины 6 и 3 (бывшие

вершинами 2 и 1) вместо этого соединить ребром той же длины, то возникает левый вариант (рис.2.2б) тетраблока. Преобразование $F_{i \rightarrow j} F_{j \rightarrow i} = 1$, т.е. F – это (нежесткое) преобразование 2-го порядка: $F_{j \rightarrow i} = (F_{i \rightarrow j})^{-1}$.

2.6.2. Неэнантиоморфный вариант тетраблока

2.6.2.1. Взаимные трансформации тетраблоков

Рассмотрим теперь плоский (неэнантиоморфный) вариант тетраблока, рис.2.2в. Он может быть переведен преобразованиями второго порядка “типа $F_{i \rightarrow j}$ ” как в правый линейный вариант (преобразованием I), так и в левый (преобразованием II). Эти преобразования представляют собой переброски тех диагоналей в “ромбах” (образованных двумя соседними треугольными гранями плоского тетраблока), которые связаны с одной из плоскостей симметрии тетраблока:

- I. Если в плоском варианте (рис.2.2в) тетраблока a) вершины 2 и 4 перенумеровать, $2 \rightarrow 4$, $4 \rightarrow 2$; б) ребро 4-7 (бывшее ребром 2-7) удалить, а вершины 2 и 6 (бывшие вершинами 4 и 6) соединить ребром той же длины, то возникает правый вариант линейного тетраблока (рис.2.2а).
- II. Если в плоском варианте (рис.2.2в) тетраблока a) вершины 7, 3 и 6 циклически перенумеровать $7 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 6$, $6 \rightarrow 7$, вершины 1 и 5 также перенумеровать, $1 \rightarrow 5$, $5 \rightarrow 1$; б) ребро 3-5 (бывшее ребром 7-1) удалить, а вершины 3 и 1 (бывшие вершинами 6 и 5) соединить ребром той же длины, то возникает левый вариант линейного тетраблока (рис.2.2б).

Таким образом, плоскость симметрии тетраблока соответствует преобразованию σ (гиперболического зеркала) и является дополнительным элементом симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока по отношению к энантиоморфным вариантам. Как показано выше, группы симметрии линейных (энантиоморфных) вариантов тетраблока изоморфны группе $PSL(2,7)$. Возможность взаимных трансформаций всех трех вариантов тетраблока с помощью преобразований второго порядка “типа $F_{i \rightarrow j}$ ” свидетельствует о том, что в группах симметрии *всех трех* вариантов тетраблока имеется подгруппа, изоморфная группе $PSL(2,7)$; для обоих энантиоморфных вариантов она совпадает с группой $PSL(2,7)$. Плоский (неэнантиоморфный) вариант тетраблока – промежуточный между правым и левым вариантами, поэтому его группа симметрии должна содержать также преобразование 2-го порядка (не принадлежащее группе $PSL(2,7)$), отображающее правый и левый варианты тетраблока друг в друга. Оба условия выполняются для группы, содержащей группу $PSL(2,7)$ в качестве подгруппы индекса 2. Подобно тому, как группа вращений октаэдра (куба) О

является подгруппой индекса 2 группы симметрии октаэдра (куба) O_h , группа $PSL(2,7) \equiv {}^7O$ является подгруппой индекса 2 проективной общей линейной группы $PGL(2,7) = (PSL(2,7) : 2) \equiv {}^7O_d$ порядка 336 [22, с.206; 170]. Двоеточие “:” обозначает полупрямое произведение групп (в котором нормальная подгруппа стоит на первом месте). Таким образом, можно предположить, что группа $PGL(2,7) \equiv {}^7O_d$ является группой, изоморфной группе симметрии плоского варианта тетраблока. Тот факт, что триангулированные многообразия, связанные с группой $PSL(2,7)$, являются энантиоморфными (хиральными), а с группой $PGL(2,7)$ – неэнантиоморфными, отмечен в работе [185].

2.6.2.2. Разбиение удвоенных вершин квартики Клейна на 7 наборов

При рассмотрении квартики Клейна было отмечено, что правому и левому кубам на рис.2.6 a и рис.2.6 b соответствуют смежные классы в разложениях (2.6) и (2.7) группы $PSL(2,7)$ по подгруппам O' и $O'' = \sigma O' \sigma$, см. соотношение (2.14) раздела 2.8. При этом всем 7 правым (левым) кубам соответствует одна орбита группы C_7 . Преобразование σ связывает правый и левый кубы разбиений, представленных на рис.2.6. Добавим квадратики, изображенные на рис.2.6 b , к кружкам, изображенным на рис.2.6 a (или наоборот), а затем все символы сделаем одинаковыми. В результате получим 7 пар эквивалентных кубов, которым соответствует одна орбита группы C_7 из таких удвоенных объектов. Эта орбита определяется разложением группы 7O_d на 7 пар смежных классов ($O \bigcup \sigma O$):

$${}^7O_d = \bigcup_{r=1}^{14} g_r O = \bigcup_{q=1}^7 g_q (O \bigcup \sigma O) = C_7 \cdot (O \bigcup \sigma O), \quad (2.8)$$

где $g_r \notin O$, $g_q \notin (O \bigcup \sigma O)$; разложение группы 7O_d по подгруппе O содержит 14 смежных классов, а разложение по $(O \bigcup \sigma O)$ – 7 смежных классов, поскольку порядок группы 7O_d равен 336, порядок группы O – 24, а объединение $(O \bigcup \sigma O)$ содержит 48 элементов.

2.6.2.3. Пересортировка удвоенных вершин квартики Клейна: от 7 наборов к 4 наборам

Вершины плоского (неэнантиоморфного) варианта тетраблока, рис.2.2 e , могут быть разделены на 4 неэквивалентных типа по количеству и симметрии сходящихся ребер: шесть ребер сходятся в двух вершинах; три ребра сходятся в двух других вершинах; четыре ребра сходятся еще в двух вершинах, через которые проходит плоскость симметрии; наконец, четыре ребра встречаются в одной вершине, через которую проходят две плоскости

симметрии и ось C_2 . Плоский вариант тетраблока обладает подгруппой C_{2v} точечной симметрии, а его вершины взаимно-однозначно соответствуют семи парам кубов. Поэтому следует произвести пересортировку этих 7 пар кубов по инвариантности относительно абелевой подгруппы $C_2 \times C_{1\sigma}$, изоморфной группе C_{2v} , где $C_{1\sigma}$ - группа, изоморфная C_{1v} и состоящая из 1 и σ , $\sigma^2 = 1$; символ \times означает “прямое произведение”. Такая пересортировка должна привести к разложению одной орбиты пар кубов группы C_7 из соотношения (2.8) на 4 орбиты пар кубов группы $C_2 \times C_{1\sigma}$:

$${}^7O_d = \bigcup_{r=1}^{14} g_r O = \bigcup_{q=1}^7 g_q (O \bigcup \sigma O) = \bigcup_{n=1}^4 (C_2 \times C_{1\sigma}) g_n (O \bigcup \sigma O), \quad (2.9)$$

где $g_1 = 1$, $g_n \notin (O \bigcup \sigma O)$, $g_n \notin (C_2 \times C_{1\sigma})$.

Поскольку $C_2 \cdot O = O$, $(C_2 \times C_{1\sigma})(O \bigcup \sigma O) = \sigma O \bigcup O$, $C_{1\sigma} g_n = g'_n C_{1\sigma}$ (где $g'_n \notin (O \bigcup \sigma O)$, $g'_n \notin (C_2 \times C_{1\sigma})$), то разложение (2.9) группы 7O_d принимает вид:

$$\begin{aligned} & \bigcup_{n=1}^4 (C_2 \times C_{1\sigma}) g_n (O \bigcup \sigma O) = \\ & = (\sigma O \bigcup O) \bigcup C_2 g'_2 (\sigma O \bigcup O) \bigcup C_2 g'_3 (\sigma O \bigcup O) \bigcup C_2 g'_4 (\sigma O \bigcup O). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Из соотношения (2.10) можно видеть, что только одна вершина – она соответствует объединению $(\sigma O \bigcup O)$ – лежит на двойной оси C_2 (это вершина 6 на рис.2.2б); остальные 3 пары вершин (1 и 2, 4 и 5, 3 и 7 на рис. рис.2.2б) отображаются осью C_2 друг в друга.

2.6.2.4. Группа симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока.

Для того чтобы выявить группу симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока, требуется воспользоваться концепцией “цветной” симметрии; это аналогично тому, что ранее было сделано для энантиоморфных вариантов тетраблока. Результат состоит в том, что группой симметрии неэнантиоморфного варианта тетраблока является группа $({}^7O_d)^W$ цветной симметрии, которая изоморфна группе ${}^7O_d \equiv PGL(2,7)$ и имеет порядок 336. Согласно теории цветной симметрии [206], группа $({}^7O_d)^W$ получается заменой всех элементов g группы 7O_d , кроме элементов группы C_2 и двух преобразований σ (соответствующих плоскостям симметрии точечной группы C_{2v} плоского варианта тетраблока), на элементы gw , где w – нежесткое преобразование, не принадлежащее группе 7O_d .

2.7. Симметрия цепей, полученных сборкой тетраблоков: теоретико-групповое описание

2.7.1. Замкнутые спирали из тетраблоков: описание симметрии

Группой симметрии политопа $\{3,3,5\}$ является группа $(A_5 \times A_5) : 2^2$; она имеет порядок $14400 = (60 \cdot 60) \cdot 4$ [6, 24] и представляет собой полупрямое произведение прямого произведения $(A_5 \times A_5)$ и абелевой группы 2^2 , где A_5 – знакопеременная группа степени 5, изоморфная группе вращений икосаэдра порядка 60, а группа 2^2 изоморфна группе D_2 порядка 4. В группе $(A_5 \times A_5) : 2^2$ нет циклической подгруппы 7-го порядка C_7 и поэтому нет ее надгрупп $PSL(2,7)$ и $PGL(2,7)$. Таким образом, хотя тетраблок – это часть политопа $\{3,3,5\}$, но группа симметрии этого политопа не содержит (в качестве подгрупп) группы $PSL(2,7)$ и $PGL(2,7)$, изоморфные, соответственно, группам симметрии энантиоморфного и неэнантиоморфного вариантов тетраблоков.

Политоп $\{3,3,5\}$ обладает определенным набором винтовых осей симметрии: 10/1 (с углом вращения $\theta = 36^\circ$), 6/1 ($\theta = 60^\circ$) [174]; 30/11 ($\theta = 132^\circ$) [6]; $(30/11)^2 = 15/4$ и др. В том случае, когда какая-то ось оказывается винтовой осью спиральной упаковки тетраблоков (не имеющих общих тетраэдров) в политопе $\{3,3,5\}$, данная спиральная упаковка обладает группой некристаллографической симметрии. Для таких замкнутых цепей из тетраблоков, находящихся в политопе $\{3,3,5\}$, симметрия тетраблока и симметрия политопа сосуществуют. Это реализуется в рамках охватывающей конструкции, группы Вейля $W(E_8)$ – точечной группы порядка $2^{14} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7$ [192, p.85]; $W(E_8)$ – группа симметрии координационной сферы решетки E_8 . Политоп $\{3,3,5\}$ определяется решеткой E_8 (поскольку в решетку меньшей размерности его вложить невозможно); группа $W(E_8)$ содержит в качестве подгрупп как группу $(A_5 \times A_5) : 2^2$, так и группы $PSL(2,7)$, $PGL(2,7)$:

$$(A_5 \times A_5) : 2^2 \subset W(E_8) \supset PGL(2,7). \quad (2.11)$$

Минимальная подгруппа группы $W(E_8)$, содержащая группу $PGL(2,7)$ в качестве подгруппы, – это $A_8 : 2$, где A_8 – знакопеременная группа степени 8 [192, p.22,85]. Группы $A_8 : 2$ и A_8 допускают представление в виде произведения своих подгрупп [208, p.58]:

$$A_8 : 2 = (A_5 : 2) \cdot PGL(2,7), \quad A_8 = G \cdot (2^3 : PSL(2,7)) \quad (2.12)$$

где нетривиальный элемент 2-го порядка группы 2 можно рассматривать и как отражение (σ) в гиперболической плоскости H^2 [170, 185]; абелева группа 2^3 изоморфна группе D_{2h} . В качестве группы G в соотношении (2.12) могут быть выбраны три группы: $GL_1(16)$, C_{15} и $C_3 \times D_{10}$, где $GL_1(16)$ – группа полулинейных биекций на конечном поле из 16 элементов, ее

порядок равен 60 [209, p.11,29]; C_3 и C_{15} – циклические группы порядка 3 и 15; D_{10} – диэдральная группа. Соотношения (2.11) и (2.12) можно объединить:

$$(A_5 \times A_5) : 2^2 \subset W(E_8) \supset A_8 : 2 = (A_5 : 2) \cdot PGL(2,7) \supset A_8 = G \cdot (2^3 : PSL(2,7)) \quad (2.13)$$

В соотношении (2.13) указана связь группы симметрии политопа $\{3,3,5\}$ с симметрией координационной сферы решетки E_8 (согласно $(A_5 \times A_5) : 2^2 \subset W(E_8)$). Это позволяет установить связь (через $A_8 \subset A_8 : 2 \subset W(E_8)$) группы симметрии политопа $\{3,3,5\}$ с группами $PGL(2,7)$ и $PSL(2,7)$, изоморфными, соответственно, группам симметрии неэнантиоморфного и энантиоморфного вариантов тетраблока. Симметрия замкнутой спирали из тетраблоков (не имеющих общих тетраэдров) определяется произведением циклической группы и группы симметрии тетраблока. Соотношение (2.13) остается справедливым, если заменить группы $PSL(2,7)$, $PGL(2,7)$, A_8 , $W(E_8)$, $(A_5 \times A_5) : 2^2$ на группы, которые им изоморфны. Тогда можно утверждать, что соотношение (2.13) устанавливает связь между симметриями замкнутых спиралей из тетраблоков в политопе $\{3,3,5\}$ и в координационной сфере решетки E_8 (которая является частью всей бесконечной решетки E_8). Отметим, что симметрия политопа $\{3,3,5\}$ – это симметрия пространства S^3 , а симметрия $PSL(2,7)$ – это симметрия пространства H^3 . В группе $W(E_8)$ существование симметрий этих пространств возникает уже в подгруппе $A_8 : 2$, представляющей собой произведение подгруппы $(A_5 : 2)$ группы симметрии политопа и группы $PGL(2,7)$.

2.7.2. От замкнутых спиралей из тетраблоков к бесконечным цепям из тетраблоков

В принципе, можно указать, каким образом перейти от замкнутых цепей из тетраблоков, находящихся согласно (2.13) в политопе $\{3,3,5\}$, к бесконечным цепям из тетраблоков; такие цепи (спирали) могут обладать некристаллографической симметрией. Прежде всего, необходимо вместо конечной группы $W(E_8)$ использовать бесконечную аффинную группу Вейля $W_a(E_8)$, затем следует заменить конечную группу S_8 соответствующей бесконечной группой [210]. Следует также использовать взаимно-однозначные соотношения между квартикой Клейна и решетками типа E_7 и E_8 ; они рассмотрены в работах [211, 212]. Однако реализация данной схемы для определения симметрии незамкнутых цепей из тетраблоков выходит за рамки данной работы.

Очевидно, что если цепь (спираль), собранная из тетраблоков по единому закону, обладает некристаллографической (скрытой) симметрией, то эта симметрия должна определяться надгруппами группы $PSL(2,7)$, которые вкладываются в группы, гарантирующие необходимую тетраэдрическую структуру системы. В частности, такими

группами являются конечная $W(E_8)$ (соотношение (2.13)) или бесконечная $W_{af}(E_8)$ [16, с.131; 211] группы симметрии решетки E_8 ; группа $W(E_8)$ позволяет построить политоп $\{3,3,5\}$. Надгруппой $PSL(2,7)$ является и группа Матье M_{24} (порядка $2^{10} \cdot 3^3 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 23$) [16, с.346]; ее подгруппа $PSL(2,11)$ (порядка 660) также может отображать симметрию объединения тетраэдров [79, 199]. Подчеркнем еще раз, что при оценке симметрии цепей из тетраблоков нужно иметь в виду, что группами симметрии тетраблоков являются не $PSL(2,7)$ и $PGL(2,7)$, а группы, которые им изоморфны.

Минимальное отклонение от симметрий классической кристаллографии возникает в группе симметрии икосаэдра: в ней, помимо осей симметрии 2-го и 3-го порядков ее кристаллографической подгруппы T , есть еще ось 5-го порядка. Это выражается в соотношениях $(g_2)^2 = (g_3)^3 = (g_2 \cdot g_3)^5 = 1$ для порождающих элементов группы симметрии икосаэдра. Группа симметрии энантиоморфных вариантов тетраблока изоморфна некристаллографической группе $PSL(2,7)$, которая содержит кристаллографическую подгруппу T . Порождающие элементы группы $PSL(2,7)$ связаны следующими соотношениями [192, р.3]: $(g_2)^2 = (g_3)^3 = (g_2 \cdot g_3)^7 = 1$. Таким образом, группа $PSL(2,7)$, в которой, помимо осей 2-го и 3-го порядков ее кристаллографической подгруппы T , есть еще ось симметрии 7-го порядка, представляет собой аналог группы вращений икосаэдра в отношении степени отклонения от кристаллографической симметрии. Группа вращений икосаэдра является симметрийной основой многочисленных структурных приложений [178, 213], поэтому использование группы $PSL(2,7)$ представляется также многообещающим: оно может породить новые структурные приложения, и некоторые работы уже известны [148, 170, 214].

2.7.3. Примеры тетраблочных спиралей

При объединении в E^3 двух тетраблоков по торцевым граням возможно возникновение трех вариантов, различающихся углами поворота φ (по часовой стрелке в плоскости общей грани) второго тетраблока относительно первого ($\varphi = 0^\circ, 120^\circ, 240^\circ$). Поэтому, соединяя единообразно линейные варианты тетраблоков одинаковой хиральности по торцевым граням, можно получить три варианта “тетраблочных спиралей” (Рис.2.7) с разными углами вращения θ .

2.7.3.1. Спирали типа Бердийка–Коксетера

Действительно, если $\varphi = 0^\circ$, то воспроизводится (правая или левая) спираль Бердийка–Коксетера [141, с.89] с иррациональным значением угла $\theta = 131.81\dots^\circ$, рис.2.7а. Линейная цепь из восьми объединенных по торцевым граням одинаковых правильных тетраэдров

(имеющая 11 вершин) обладает группой симметрии, изоморфной группе $PSL(2,11)$ порядка 660 [79, 199]. С другой стороны, эта цепь является линейным объединением по торцевым граням двух энантиоморфных вариантов тетраблока при $\varphi = 0^\circ$. Следовательно, спираль Бердийка–Коксетера, рис.2.7 a , можно представить как объединение по торцевым граням при $\varphi = 0^\circ$ тетраблоков или *пар* тетраблоков (т.е. разных “идеальных” прототипов). Спираль Бердийка–Коксетера из правильных тетраэдров не обладает трансляционной симметрией, но таковая возникает при искажениях тетраэдров, а *минимальные* искажения отвечают периоду в 8 тетраэдров [215, 216], т.е. паре тетраблоков. Подобный стержень из 8 искаженных тетраэдров использован при описании некоторых реальных кристаллических структур [215], например, структуры β -Mn (рис.8 a , адаптирован с рис.3 работы [166]. Существуют другие примеры типа Fe_2Re_3 , Ru_2Mg_3 , похожей структурой является структура Mo_3Al_2C и др. [215]; тетраэдры CuI_4 аниона (т.е. I) в кристаллическом $[(C_6H_5)_4P] [Cu_3I_4]$ встречаются также в форме спирали из объединенных по граням тетраэдров (с небольшими искажениями); цепь достигает трансляционно-идентичного расположения после восьми тетраэдров [217].

2.7.3.2. Тетраблочная спираль с осью 40/11 и α -спираль

Пусть $\varphi = 120^\circ$; образуется второй вариант “тетраблочной” спирали. Назовем “центром” линейного варианта тетраблока вершину типа 3 на рис.2.2 a , т.е. единственную общую вершину 4-х тетраэдров. Оказалось [78, 84], что существует реальная макромолекулярная структура, обладающая близкими параметрами (ось вращения, отношение шага к радиусу): это α -спираль, являющаяся одним из самых общих элементов вторичной структуры в белках [167, 218]. Было показано [78, 84], что экспериментальные структурные данные α -спирали [218] отвечают теоретической спирали с винтовой осью 40/11, и что если в каждом правильном тетраэдре этой тетраблочной спирали несколько изменить длины 2-х ребер из 6-ти (так, что разница со средним значением для каждого ребра составит величину $\sim 2\%$), то центры таких тетраблоков образуют спираль тоже с осью 40/11 (угол $\theta = 99^\circ$, рис.2.7 δ). Число вершин на виток в идеальной спирали 40/11 равно 3.63(63). Вершины спирали 40/11 следует совместить с атомами C_α в α -спирали (рис.2.8 δ , адаптировано с рис.5-4 книги [219]); с последними связаны аминокислотные остатки.

Ось α -спирали аппроксимировали в литературе следующими осями: 18/5 (3.6 ост/виток), 11/3 (3.67 ост/виток), 15/4 (3.75 ост/виток) [220]; 7/2 (3.5 ост/виток) [221]; 41/11 (3.73 ост/виток) [143, 222] и другими; более подробно см., напр. [168]. Экспериментальным данным по структуре α -спирали ($\sim 3.5 - 3.75$ ост/виток) отвечает не любая ось; например, ось 30/11 (2.72(72) ост/виток) не подходит.

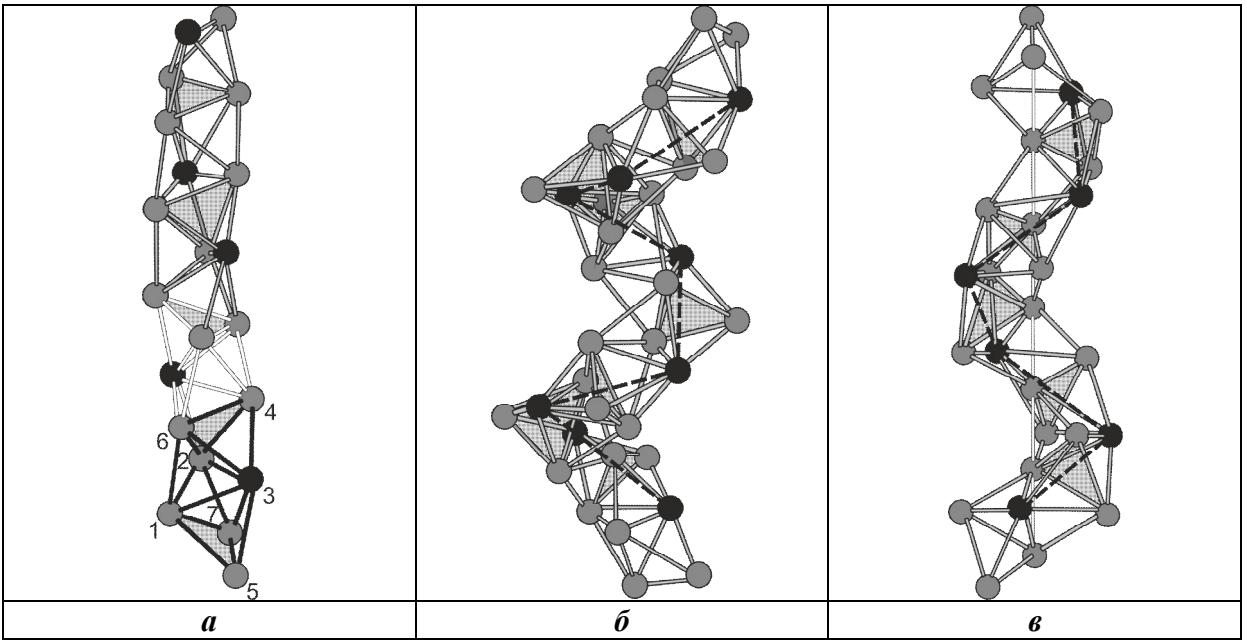


Рис.2.7. Шаро-стержневые модели спиральных объединений по торцевым граням правых линейных вариантов тетраблока. Центры тетраблоков (центр тетраблока – это общая вершина 4-х тетраэдров, т.е. вершина типа 3 на рис.2.2а) обозначены черными шарами, а общие грани соседних тетраблоков окрашены в серый цвет. Угол поворота φ (по часовой стрелке в плоскости общей грани) каждого последующего тетраблока относительно предыдущего может принимать 3 значения: 0° , 120° и 240° . При $\varphi = 0^\circ$ (а) возникает правая спираль Бердийка–Коксетера из тетраэдров (тетраспираль), угол вращения спирали имеет иррациональное значение $\theta = 131.81\dots^\circ$ [141, с.89]; ребра нижнего тетраблока показаны черными, его вершины пронумерованы в соответствии с рис.2.2а; для большей ясности ребра второго снизу тетраблока – белые. При $\varphi = 120^\circ$ (б) центры тетраблоков образуют спираль 40/11 (показанную пунктирными линиями) с углом $\theta = 99^\circ$ [78, 84]; пояснения в тексте; При $\varphi = 240^\circ$ (в) центры тетраблоков образуют спираль 10/3 (показанную пунктирными линиями), имеющую угол $\theta = 108^\circ$ [84]; пояснения в тексте. Одна из совокупностей ребер тетраблоков в этой спирали образует ее ось (вертикальная линия из белых ребер).

Преимущества идеальной оси (40/11) перед остальными вариантами: спираль 40/11 не только количественно воспроизводит экспериментальные характеристики α -спиралей [168, 218], но и “топологически согласована” с соседними спиральями [78, fig.7(b); 223, с.142, рис.11-3]: она согласована с симметриями “идеальных” спиралей 30/11 и 10/1 из политопа $\{3,3,5\}$. Четыре последовательных оборота вокруг оси 40/11 совпадают с тремя последовательными оборотами вокруг оси 30/11 и с одним оборотом вокруг оси 10/1, т.е. $(40/11)^4 = (30/11)^3 = (10/1)^1$ [78]. “Тетраблочную спираль” сискажениями ребер $\sim 2\%$ при $\varphi = 120^\circ$ можно рассматривать как приближение идеального высокосимметричного образца α -спирали с осью 40/11. Более подробно спиральные биополимеры рассмотрены в главе 7.

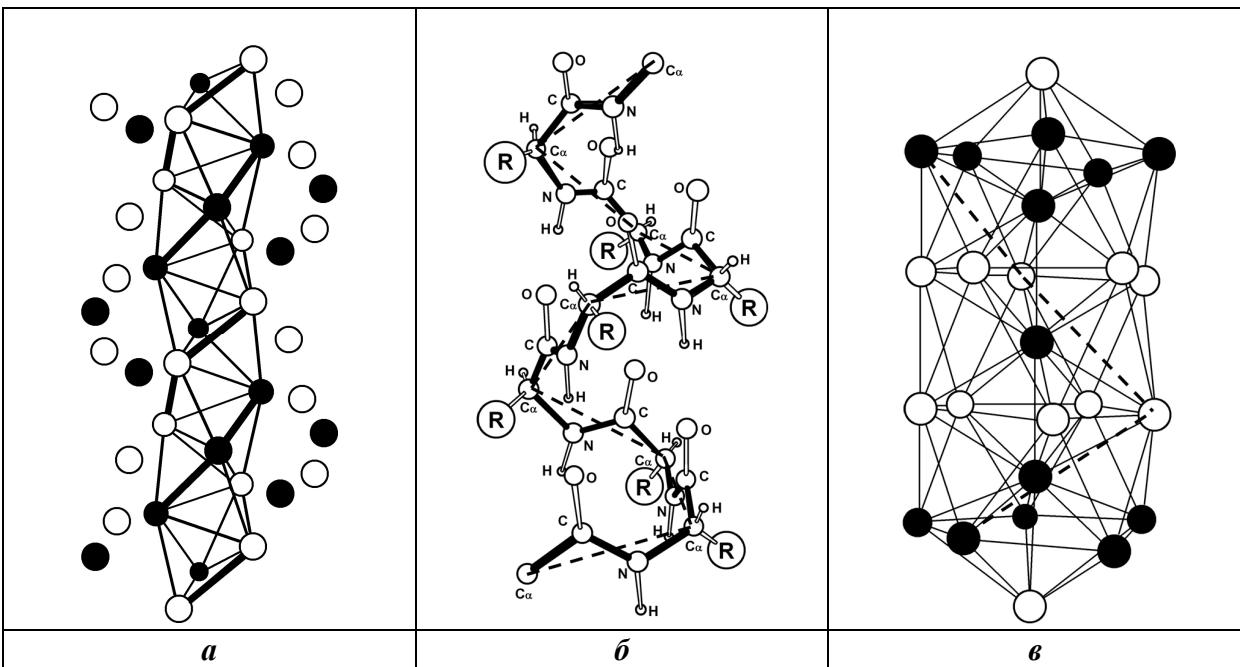


Рис.2.8.

а – Фрагмент структуры β -Mn (адаптировано с рис.3 работы [166]); один набор атомов Mn (Mn1, позиция Вайкова (Wyckoff) 8c (xxx)) представлен черными шарами, второй набор атомов Mn (Mn2, позиция Вайкова (Wyckoff) 12d (1/8,y,y+1/4)) - белыми.

Согласно описанию кристаллической структуры β -Mn, предложенному в работе [215], непересекающиеся одинаковые стержни, состоящие строго из восьми искаженных тетраэдров $(\text{Mn}1)_2(\text{Mn}2)_2$, объединенных по граням (каждый из стержней эквивалентен двум тетраблокам, объединенным по торцевым граням, см. раздел 2.7.3.1) находятся в примитивной кубической упаковке, совпадающей с осями 4_1 (или 4_3) этой структуры, и поэтому продолжаются в направлениях, параллельных всем трем осям куба. Итак, трансляционная повторяющаяся единица в стержне состоит из восьми тетраэдров (т.е. двух тетраблоков), ср. рис.2.7*а*.

б – α -спираль, т.е. спираль полипептидной цепи (*R* – аминокислотный остаток). Ход цепи выделен черным цветом (адаптировано с рис.5-4 книги [219]); каждые шесть последовательных атомов (C_α , $\text{C}=\text{O}$, $\text{N}-\text{H}$, C_α) лежат в одной плоскости. Центры атомов C_α образуют спираль 40/11 (показанную пунктирными линиями); она совпадает со спиралью, образованной центрами слегка искаженных тетраблоков рис.2.7*б*, в соответствии с данными, описанными в разделе 2.7.3.2 (см. также [78]).

в – Реализация башни из пентагональных антипризм: внутренняя часть из металлов, $\text{Au}_{13}\text{Ag}_{12}$, кластера $[(\text{Ph}_3\text{P})_{10}\text{Au}_{13}\text{Ag}_{12}\text{Br}_8]^+$ как $(\text{SbF}_6)^-$ соли (адаптировано с рис.1(а) статьи [224]); атомы Au окрашены в черный цвет, атомы Ag – белый. Совокупность атомов Au-Ag-Ag-Au этого кластера образует спираль 10/3 (показанную пунктирными линиями; можно выделить пять таких правых спиралей); эта спираль совпадает со спиралью, образованной центрами слегка искаженных тетраблоков рис.2.7*в*, см. раздел 2.7.3.3.

2.7.3.3. Тетраблочная спираль с осью 10/3 и башня из пентагональных антипризм

Пусть $\varphi = 240^\circ$; в этом случае образуется третий вариант “тетраблочной” спирали. Если в каждом правильном тетраэдре уменьшить длины 3-х ребер из 6 до $\sim 0.951 \cdot l$ от исходной длины l (чтобы из таких тетраэдров можно было бы образовать правильный икосаэдр, т.к.

расстояние между его центром и вершиной составляет ~ 0.951 длины ребра), то искажения тетраэдрических ребер оказываются незначительными (подобно таковым в предыдущих случаях): в среднем $\sim 2.5\%$. Рассматриваемая тетраблочная спираль становится тогда частью известной структуры, - “башни из пентагональных антипризм” [174, fig.2], которая представляет собой объединение взаимопроникающих правильных икосаэдров с общей осью 5-го порядка. Центры двух соседних тетраблоков – это вершины пентагональной антипризмы, которые совмещаются друг с другом при вращении на угол $\theta = (72^\circ + 72^\circ/2) = 108^\circ$ и трансляции вдоль оси башни. Угол $\theta = 108^\circ$ означает, что центры таких тетраблоков образуют спираль $10/3$ [84], рис.2.7в. Такая башня из пентагональных антипризм реализуется, например, в кластерах Au-Ag, структуры которых основаны на 13-атомных центрированных икосаэдрах, объединенных по вершинам, Рис.2.8в (адаптирован с рис.1(а) статьи [224]).

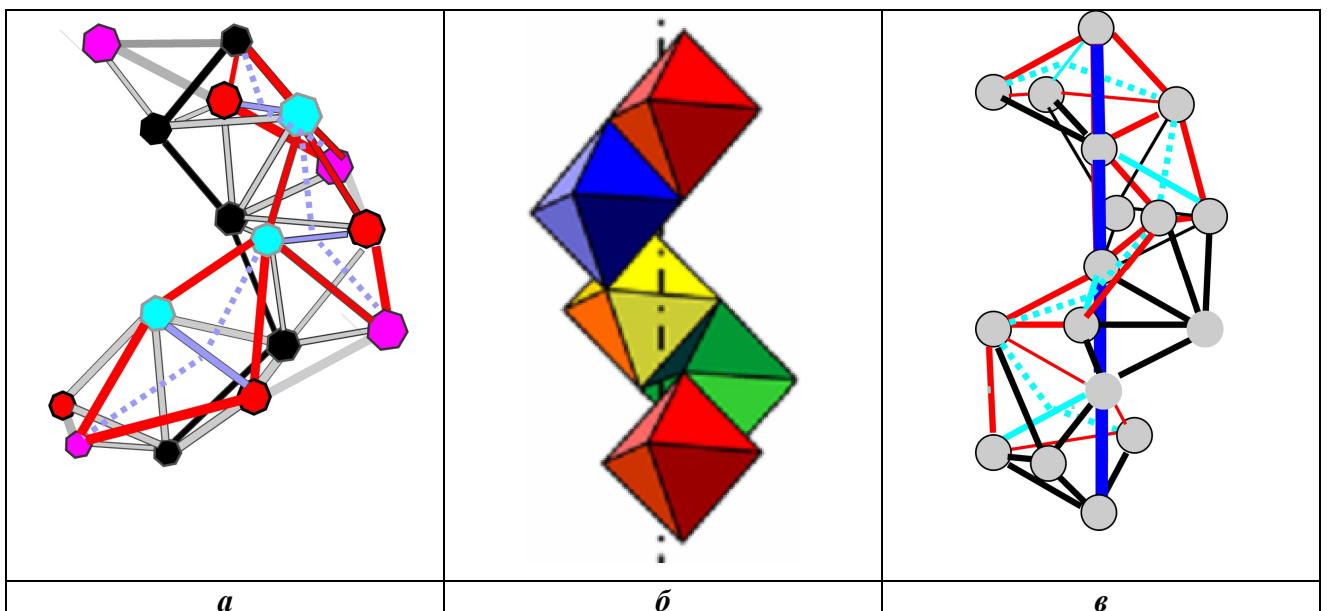


Рис.2.9. Преобразование $F_{i \rightarrow j}$ переброски диагонали в “ромбе”, образованном двумя соседними треугольными гранями тетраблока (см. раздел 2.6.1.4) можно осуществить в каждом тетраблоке спирали, образованной из тетраблоков одинаковой хиральности; тогда левая спираль (**а**) через промежуточное состояние (**б**) преобразуется в правую спираль (**в**) и наоборот. Ромбы, в которых осуществляется переброска, окрашены в красный цвет.

Наконец, отметим следующее. В разделе 2.6.1.4 было описано локальное элементарное топологическое преобразование (обмен соседями) [190] или изомеризация многогранника [191] (переброска $F_{i \rightarrow j}$ диагонали в “ромбе”, образованном двумя соседними треугольными гранями тетраблока), которое переводит правый вариант тетраблока через промежуточное состояние в левый вариант тетраблока. Если преобразование $F_{i \rightarrow j}$ осуществить в каждом тетраблоке спирали, образованной из тетраблоков одинаковой хиральности, то левая спираль преобразуется в правую спираль и наоборот (рис.2.9).

2.8. Расширение группы $PSL(2,7)$ до группы $PGL(2,7)$

В этом разделе показано, каким образом гиперболическое зеркало σ (зеркальное отражение относительно пунктирной линии на рис.2.6), расширяет проективную специальную линейную группу $PSL(2,7)$ до проективной общей линейной группы $PGL(2,7)$ и отображает группу $PSL(2,7)$ на себя. Группа $PSL(2,7)$ имеет две несопряженных подгруппы O' и O'' . Подобно тому, как группа вращений октаэдра (куба) O порядка 24 является подгруппой индекса 2 группы симметрии октаэдра (куба) O_h порядка 48, группа $PSL(2,7) \equiv {}^7O$ порядка 168 является подгруппой индекса 2 группы $PGL(2,7) \equiv {}^7O_d$ порядка 336:

$${}^7O_d = {}^7O \bigcup \sigma {}^7O = \bigcup_{r=1}^{14} g_r O, \quad \sigma^2 = 1, \quad \sigma F \sigma = F, \quad \sigma O' \sigma = O'', \quad (2.14)$$

где $\sigma \notin {}^7O$, $g_r \notin O$; символом F обозначены циклические группы C_3 и C_7 . Поскольку порядок группы 7O_d равен 336, порядок группы O - 24, то разложение 7O_d по подгруппе O в соотношении (2.14) состоит из 14 смежных классов. Группы O' и O'' сопряжены преобразованием σ ; в итоге они становятся изоморфными подгруппе O группы 7O_d .

Принимая во внимание соотношение (2.14), симметрия разбиения, дуального квартине Клейна, разбитой на левые кубы, определяется разложением группы 7O по подгруппам:

$${}^7O = \bigcup_{i=1}^{56} (\sigma g_i \sigma) C_3 = \bigcup_{j=1}^{24} (\sigma g_j \sigma) C_7 = \bigcup_{f=1}^7 g_f O'', \quad (2.15)$$

где $g_f \notin O''$, элемент σ группы 7O_d определен в (2.14), а элементы $\sigma g \sigma$ (сопряженные с элементами g внешним автоморфизмом σ группы 7O) принадлежат группе 7O . Числа смежных классов 56, 24 и 7 определяются тем, что в квартине Клейна [170, 185, 196] семиугольники сходятся по 3 в каждой из 56 вершин, принадлежащих 7 кубам. При соединении центров всех 24 семиугольников образуются 56 равносторонних гиперболических треугольников, сходящихся по 7 в каждой из 24 вершин.

2.9. Заключение

Некристаллографические симметрии структур, допускающих аппроксимацию цепями одинаковых правильных тетраэдров в 3-мерном Евклидовом пространстве E^3 , определены

отображением в E^3 высокосимметричных фрагментов структур из 3-мерных неевклидовых пространств постоянной (положительной и отрицательной) кривизны, которые задают “идеальные прототипы” для реальных структур в E^3 . Универсальной базовой симметрийной структурной единицей цепей правильных тетраэдров в E^3 является тетраблок – семивершинное линейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров. Эта максимально-возможная “единица” позволяет выявить “некристаллографическую” (“скрытую”) симметрию линейных цепей правильных тетраэдров в E^3 .

Результаты, полученные в настоящей главе, позволяют сделать следующие выводы:

1. Тетраблок соответствует нерегулярной семивершинной триангуляции сферы, которая определяется [203, p.218] регулярной семивершинной триангуляцией тора. Тетраблок является одной из реализаций этой триангуляции в виде 7-вершинного многогранника, все грани которого являются треугольниками [29, с.84, теорема 4.3; 203, p.220]: реализацией в виде линейного объединения тетраэдров. С другой стороны, это объединение по граням 4-х правильных тетраэдров, если сделать (определенным образом) неодинаковыми длины их ребер, становится частью 7-вершинного, тороидально-подобного “многогранника Császár'a” - реализации регулярной 7-вершинной триангуляции тора в виде многогранника, состоящего из 7 тетраэдров с ребрами неодинаковой длины [193].
2. Если существует надгруппа группы $PSL(2,7)$, и эта надгруппа является группой симметрии некоторой системы тетраэдров, то она обеспечивает возможность отображения некристаллографической симметрии цепей (данной системы), генерируемых тетраблоком. Если такие надгруппы группы $PSL(2,7)$ являются максимально-возможными, то они обеспечивают наиболее адекватное отображение некристаллографической симметрии цепей, которые единообразно собраны из тетраблоков по различным законам. В первую очередь к таким надгруппам относятся подгруппы группы симметрии решетки E_8 [192] и группы Матье M_{24} [16, с.346].
3. Существование симметрии тетраблока является необходимым, но не достаточным условием для того, чтобы структуры с некристаллографической симметрией присутствовали в реальных цепях, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, подобно тому, как существование федоровской группы, определяющей возможность кристаллического упорядочения, еще не гарантирует наличия соответствующего реального кристалла при данных физических условиях.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [38, 77, 78, 84, 119, 120, 122, 124, 127, 133].

Глава 3. Система порождающих кластеров плотноупакованных тетраэдрических структур (металлов). Линейные структуры из порождающих кластеров и их симметрийно-возможные трансформации

3.1. Система корней H_4 и n -вершинные, $4 \leq n \leq 10$, объединения тетраэдров

Группа отражений $[3,3,5]$ может быть задана системой образующих подгрупп [18], которые также являются группами отражений, например:

$$[3,3,5] = \{[3,5], [3,3]\} = \{[3,5], [1] \times [1] \times [1] \times [1]\}, \quad (3.1)$$

где $[3,5] = 3\bar{5}m$, $[3,3] = \bar{4}3m$, $[1] \times [1] \times [1] \times [1] = m \times m \times m \times m$. Указанные подгруппы определяют подсистемы решетки корней H_4 , которая может быть задана, например, парой подсистем:

$$H_4 = \{H_3 \times A_1, A_4\}, \quad (3.2)$$

где все векторы из H_3 перпендикулярны векторам из A_1 .

Систему H_3 образуют 30 векторов (корневой полиэдр – икосидодекаэдр), проведенных из центра икосаэдра к серединам его ребер (рис.3.1a); подсистему положительных корней $\Delta_{15}^+(H_3)$ составляют 15 таких векторов, которым перпендикулярны 15 ребер икосаэдра, соединяющих 9 его вершин. Соединив указанные вершины с центром, получим 10-вершинное объединение по граням 7 тетраэдров. Подсистему положительных корней A_4 составляют 10 векторов $\Delta_{10}^+(A_4)$, проведенных из центра сферы S^3 к серединам ребер 5 тетраэдров, которые составляют политоп $\{3,3,3\}$. При наложении определенных ограничений на простые корни $\Delta_{10}^+(A_4)$, последняя может быть отображена в 3-мерную систему $\Delta_n^+(A_{4-1})$, $n \leq 9$. Середины ребер тетраэдра есть вершины октаэдра, таким образом $\Delta_n^+(A_{4-1})$ определяет не более чем 10-вершинное (9 векторов и начало координат) объединение тетраэдров и октаэдров (полуоктаэдров).

Возможность восстановления A_4 по A_{4-1} и $H_3 \times A_1$ по H_3 , позволяет задать систему H_4 максимальными трехмерными подсистемами корней:

$$H_4 = \{H_3, A_{4-1}\} = \{\Delta^+(H_3), \Delta^+(A_{4-1})\} \quad (3.3),$$

которые определяются не более чем 10-вершинными объединениями по граням тетраэдров и других триангулированных полиэдров. Определяемые (3.3) кластеры назовем

порождающими кластерами плотноупакованных тетраэдрических структур (ПКТ). В силу (3.3), число вершин в ПКТ не должно превышать 10, что согласуется и с "критерием Бернала" [225], согласно которому полиэдры пустоты и псевдоячейки характеризуются числом вершин от 4 до 10.

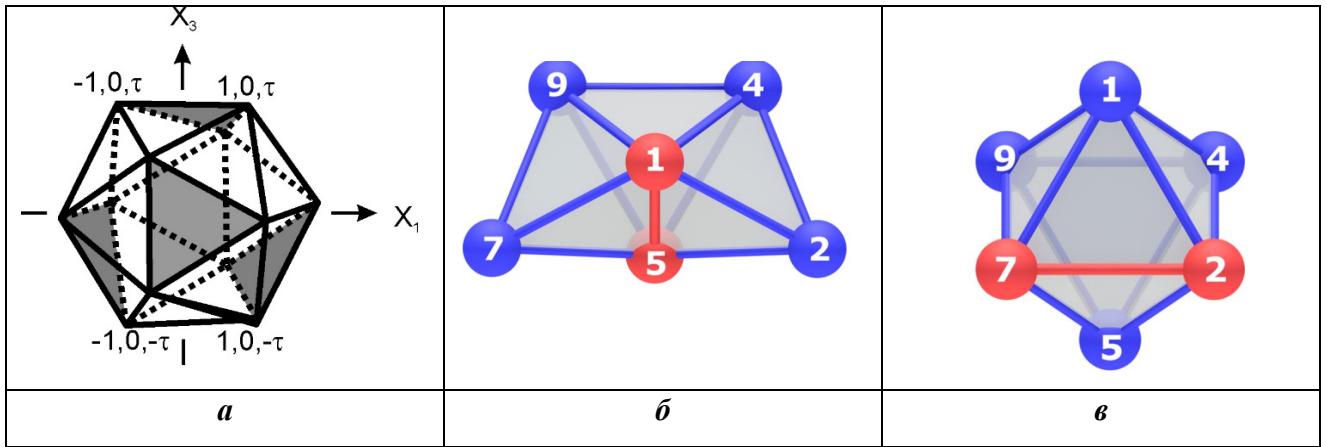


Рис.3.1. (а) Икосаэдр $\{3,5\}$; три двойных оси которого совпадают с осями X_1 , X_2 , X_3 декартовой системы координат. 4 выделенных треугольника и центр икосаэдра принадлежат 4 тетраэдрам, охватывающим все вершины икосаэдра.

Переброска короткой диагонали 1-5 «ромба» 1257 в объединении по граням трех тетраэдров (б) трансформирует это объединение в октаэдр (в) с короткой диагональю 2-7 «ромба» 1257.

Два полиэдра называются элементарно-подобными, если могут быть преобразованы друг в друга посредством конечного числа элементарных операций: одномерного подразделения (новая вершина разбивает ребро на два) и обратной операции одномерного укрупнения; двумерного подразделения (новое ребро разбивает грань на две) и обратной операции двумерного укрупнения. Нетождественное произведение двумерного укрупнения и двумерного подразделения [29] представляет собой, например, переброску диагонали в "ромбе" из двух треугольных граней икосаэдра (рис. 3.1.а). Действительно, замена короткой диагонали в таком "ромбе" на длинную меняет число сходящихся в его вершинах ребер на ± 1 , что эквивалентно проведению $+2\pi/5$, $-2\pi/5$, $+2\pi/5$, $-2\pi/5$ дисклинаций через каждую из указанных вершин. Дисклинационный квадруплет осуществляет, например, трансформацию объединения тетраэдров в элементарно-подобный триангулированный полиэдр. В качестве примера такого преобразования рассматривается переброска общего ребра в объединении трех правильных тетраэдров, переводящая этот тетраэдрический кластер в правильный октаэдр (рис.3.1б,в).

Показанное на (рис.3.1б,в) преобразование не является жестким движением, сохраняющим расстояния между точками, а представляет собой дробно-линейное

преобразование, которое является одним из видов преобразования в гиперболической плоскости (плоскости Лобачевского) [226]. Согласно (3.3), ПКТ определяется политопом $\{3,3,5\}$. В то же время, вложение триангулированных полиэдров в плоскость Лобачевского (рис.3.2) определяет необходимость применения групп дробно-линейных преобразований для отображения симметрии ПКТ.

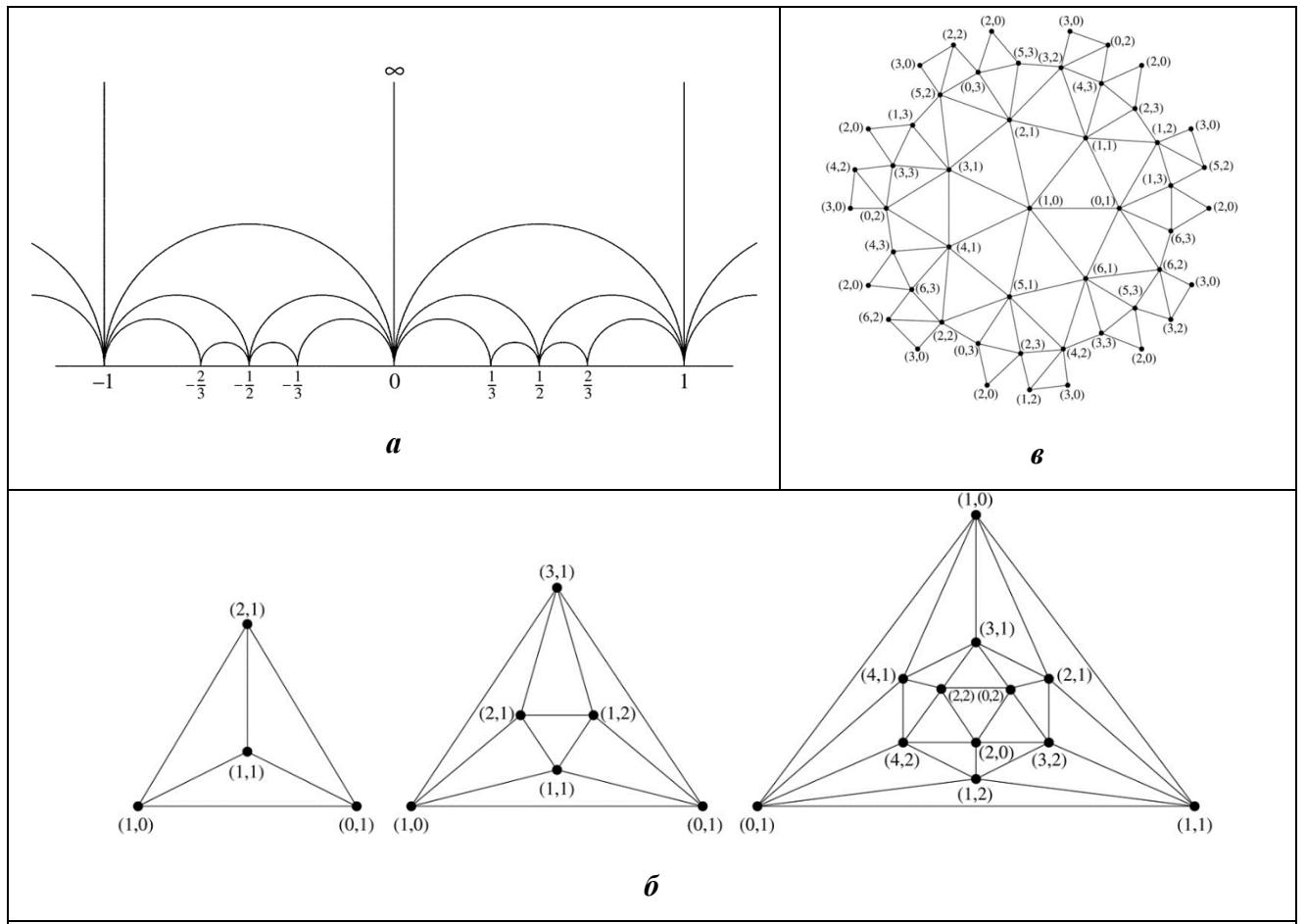


Рис.3.2. [226] **(а)** Триангуляция Фарея гиперболической плоскости. Две вершины a/c и b/d соединяются ребром если $ad-bc=\pm 1$, $\infty=1/0$.
(б) Две вершины (a,b) и (c,d) триангулированного полиэдра, для которых выполняется условие $ad-bc=\pm 1(\text{mod } n)$, являются проекциями $M_3(n)$ соседних вершин графа Фарея. Тетраэдр, октаэдр, икосаэдр, квартика Клейна являются отображениями $M_3(n)$ триангуляции Фарея при $n=3,4,5,7$.
(в) Квартика Клейна (см. рис.1.8), определяемая отображением $M_3(7)$.

Таким образом, порождающим кластером плотноупакованных тетраэдрических структур (ПКТ) является не более чем 10-вершинное объединение тетраэдров по граням или элементарно-подобный ему триангулированный полиэдр, определяемый 3-мерной подсистемой корневых векторов, которая вкладывается (отображается) в решетку корней H_4 .

Согласно (3.3), произведение плоскостей отражения (определяющих простые корни подсистемы корней) является порождающим элементом циклической подгруппы группы $[3,3,5]$, которой соответствует ось политопа $\{3,3,5\}$. Подсистемы $A_2 \times A_1$, $H_2 \times A_1$ и $A_1 \times A_1 \times A_1$ определяют оси 6_1 , 10_1 и 2 , действующие в стержнях из взаимопроникающих икосаэдров с общей 3 , 5 и 2 осями, поэтому можно утверждать, что определяемые указанными подсистемами, ПКТ представляют собой наборы тетраэдров из этих стержней. Многоугольник Петри политопа $\{3,3,5\}$ определяет нецелочисленную ось $30/11$, которая реализуется в образованной тетраэдрами тетраспирали (рис.2.1, 2.7a). Подсистема H_3 определяет наборы тетраэдров из икосаэдра.

Элементарно-подобные комплексам тетраэдров равнореберные триангулированные полиэдры определяются отображаемыми из $\Delta^+(A_n)$ и $\Delta^+(D_4)$ подсистемами A_{4-1} и D_{4-1} . (Так как $\{H_3, A_4\} \subset D_6 \subset E_8$, то в общем случае возможны триангулированные полиэдры, определяемые и подсистемой D_{6-3}).

Для 4-мерной системы корней введем обозначение: $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 = 1234$; отсутствие слагаемого в сумме задается отсутствием соответствующей цифры; увеличение вектора α_i в n раз - символом (ni) , $n = 2, 3, \dots$, вектору $-\alpha_i$ соответствует \bar{i} .

Подсистема $\Delta^+(D_4)$ содержит 6 корней системы $D_3=A_3=\{1,2,3,12,23,123\}$ и 6 корней $\{4,24,124,234,1234,1(22)34\}$, содержащих α_4 . Отображение α_4 в 0 позволяет получить подсистему $\Delta_7^+(D_{4-1}) = \{1, 2, 3, 12, 23, 123, 1(22)3\}$, в которой простой корень α_3 перпендикулярен простому корню α_1 . Отбросив α_3 , получаем в подсистему $\Delta_6^+(D_{4-1}) = \{1, 2, 12, 23, 123, 1(22)3\}$, определяющую одношапочный октаэдр – объединение октаэдра и тетраэдра из ГЦК-решетки (рис.3.3).

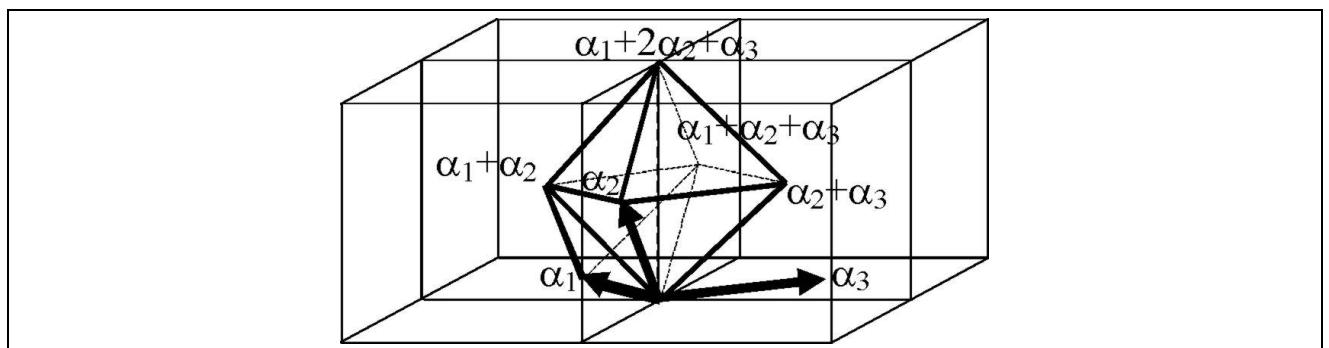


Рис.3.3. Корни из системы корней C_3 как подмножество векторов ГЦК решетки. Без простого корня α_3 они определяют одношапочный октаэдр – октаэдр с тетраэдром $(0, \alpha_1, \alpha_1+\alpha_2, \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)$, стоящим на его грани. Простые корни показаны жирными стрелками.

Условия $\alpha_4 = 0$, $\alpha_3 = 2\alpha_1$, наложенные на $\Delta^+(D_4)$ приводят к системе корней $\Delta^+(G_2) = \{1, 2, 12, (21)2, (31)2, (31)(22)\}$ (корень $2\alpha_1$ отбрасывается в силу наличия в системе корня α_1), которая возникает вследствие k -квазиразложимости D_4 [30]. Появление не вкладываемой непосредственно в H_4 системы корней G_2 обусловлено тем, что задаваемая системой корней G_2 исключительная простая группа Ли G_2 – подгруппа в группе вращений SO_7 , состоящая из автоморфизмов алгебры октавы e_8 , системой корней которой является E_8 [16]. Система G_2 (точнее $G_2 \times A_1$) определяет в качестве ПКТ гексагональную бипирамиду, необходимость введения которой обусловлена тем, что если 5 идеальных тетраэдров имеют в E^3 общее ребро, тогда между гранями 1^{го} и 5^{го} остается зазор в 0.104 идеального тетраэдра.

Соотношения между системой корней D_4 и определяемыми ею (по k -квазиразложимости) подсистемами представлены таблицей на рис.3.4a. Во второй строке этой таблицы представлены положительные корни D_3 , а в первой строке – положительные корни D_4 , не принадлежащие D_3 . В третьей строке показано, что при отображении в системе D_4 корня α_4 в 0 и отбрасывании корня α_3 , происходит переход к системе C_3 . В четвертой строке показано, что при $\alpha_4 = 0$ и $\alpha_3 = 2\alpha_1$ система D_4 отображается в G_2 .

Корневые вектора $\Delta_6^+(D_{4-1})$ являются и корневыми векторами системы C_3 , которая возникает из алгебры E_7 при k -квазиразложимости [30]. Поэтому все рассматриваемые системы корней можно связать соотношениями k -квазиразложимости и вложения:

$$E_7 \rightarrow C_3, \quad E_7 \rightarrow F_4 \supset D_4 \rightarrow G_2 \leftarrow H_4 \leftarrow E_8, \quad D_4 \supset D_3 = A_3 \subset A_4, \quad (3.4)$$

где система корней F_4 состоит из двух координационных сфер решетки корней D_4 . Группой Коксетера решетки F_4 является группа [3,4,3], отображающая на себя политоп {3,4,3}.

При отображении α_4 в α_2 подсистема $\Delta^+(A_4) = \{1, 2, 3, 12, 23, 123, 4, 34, 234, 1234\}$ отображается в $\Delta_8^+(A_{4-1}) = \{1, 2, 3, 12, 23, 123, (22)3, 1(22)3\}$, которая без α_3 определяет ромбоэдр, состоящий из октаэдра и двух тетраэдров или из двух одношапочных октаэдров, связанных центром инверсии. Чтобы перейти к “несоставному” полиздру перебросим (посредством дисклинационных квадруплетов q) диагонали в двух соседних ромбах этого ромбоэдра и перейдем в элементарно-подобный триангулированный полиздр, являющийся полиздром Бернала Z8. Таким образом, система векторов $\Delta_7^+(A_{4-1})^q$ определяет Z8 (по такому же алгоритму могут быть получены и полиздры Бернала Z9 и Z10).

	2, 4	1,2,4	2,3,4	1,2,3,4	1,2·2,3,4			4	
1	2	1,2	2,3	1,2,3			3		D ₃
1	2	1,2	2,3	1,2,3	1,2·2,3		3		D ₄ →C ₃
1	2	1,2	2·1, 2	3·1, 2	3·1, 2·2	G ₂	2·1		

a

b

Рис.3.4. Иерархия максимальных подкорневых систем некристаллографической системы корней H_4 .

(*а*) Подсистемы положительных корней $D_4, D_3, D_4 \rightarrow C_3$ и G_2 . Вектор $\Sigma c_i \alpha_i$ задается символом $c_{11}, c_{22}, c_{33}, c_{44}; c_i = 0, 1, 2, 3$; в котором при $c_i = 0$, позиция опускается. В 3-ей строке выделено 6 векторов подсистемы $D_4 \rightarrow C_3$, которые определяют одношапочный октаэдр (рис. 3.3.).

(*б*) В первой, второй и третьих строках схемы расположены 4, 3 и 2-мерные подсистемы корней. Символами A_{4-1}, C_{4-1} и D_{4-1} обозначены 3-мерные подсистемы A_4, C_4 и D_4 . Жирными линиями показана схема к-квазиразложимости D_4 в G_2 . Подсистема $30/II (H_4)$ не является максимальной подкорневой системой.

3.2. Система порождающих кластеров тетраэдрических структур

Вкладываемые (или отображаемые) в H_4 подсистемы корней образуют систему (рис.3.4*б*), которая определяет строение системы ПКТ (табл.3.1). В первых пяти столбцах находятся объединения тетраэдров: в 3-м – принадлежащие икосаэдру, в остальных – стержням из тетраэдров, определяющих оси политопа $\{3,3,5\}$. В 6-ом столбце расположены полидры – пустоты Бернала, являющиеся равнореберными триангулированными полидрами Залгалера. Для обозначения полидров используются символы Залгалера: M_1 – тетраэдр, M_2 – полуоктаэдр, $2M_2$ – октаэдр, nM_1 – объединение n тетраэдров с общим ребром.

В табл.3.1 приводятся изображения ПКТ с внутренними ребрами, которым соответствует “верхний” номер; этот же ПКТ без внутренних ребер обозначается “нижним”

номером. Например, ПКТ № 17 – объединение 5 тетраэдров; ПКТ №25 – пентагональная бипирамида. Символ $M_1^m + \text{№}_j + kM_1$ обозначает, что “сверху” на грани ПКТ № j “поставлены” m тетраэдров, а “снизу” к нему добавлено объединение k тетраэдров. В символе ПКТ 5 столбца указывается число вершин в объединении тетраэдров из цепочки Бернала.

Число вершин полиэдров последовательно возрастает от строки к строке; в каждой из 7 строк находятся элементарно-подобные полиэдры. В 4-ой строке находятся особо симметричные 7-вершинные ПКТ № 16, 25, 18, 24. Для перехода по строке между ПКТ разных столбцов необходимо в исходном ПКТ удалить внутренние ребра, найти “ромб” из двух треугольных граней и заменить в нем короткую диагональ длинной. Требование равенства ребер (и восстановление внутренних ребер) приводит к трансформации исходного ПКТ в ПКТ другого столбца. Всего систему ПКТ образуют 27 ПКТ без внутренних ребер и 9 ПКТ с внутренними ребрами. 10-вершинный ПКТ № 37 определяется системой корней $\{\Delta_6^+(D_{4-1}), \bar{2}, \bar{13}, (21)23\}$ и представляет собой ПКТ № 24 с тремя дополнительными треугольными гранями.

Помимо рассмотренных выше икосаэдрически-политопных ограничений числа корней и “критерия Бернала”, ограничивающего число N , $4 \leq N \leq 10$ вершин ПКТ существует и более общее симметрийное обоснование верхней границы N . Вложение триангулированных полиэдров в плоскость Лобачевского (рис.3.2) показывает возможность существования неевклидовых конструкций, которые соответствуют ПКТ.

В следующей главе будет показано, что такими конструкциями являются конструкции конечной проективной геометрии - конфигурации, определяющие, в частности, $2V$ -вершинные бихроматические (V белых и V черных вершин) разбиения тора, содержащие и его V -вершинные триангуляции. Каждому ПКТ соответствует N -вершинная триангуляция сферы, которая, согласно [203, p.218], может быть получена из V -вершинной, $4 \leq N \leq V$ триангуляции тора. Согласно [227], триангуляция тора с любым числом вершин сводится к комбинации триангуляций тора с числом вершин не превышающим 10, так как у любой неприводимой триангуляции тора число вершин $V \leq 10$. Таким образом, N -вершинные ПКТ, которые соответствуют V -вершинным триангуляциям тора с $V \leq 10$, являются “неприводимыми” строительными единицами. При $V = 7, 8, 9$ и 10 неевклидовыми конструкциями, определяющими ПКТ, являются высокосимметричные самодуальные конфигурации Фано, Мебиуса, Паппа и Дезарга (табл.1.3). Наиболее симметричной из всех этих конфигураций является конфигурация Фано, определяющая 7-вершинную триангуляцию тора, которая вкладывается в квартику Клейна, являющуюся (наряду с

тетраэдром, октаэдром и икосаэдром) соответствующим отображением триангуляция Фарея гиперболической плоскости (рис.3.2). Таким образом, в главе 2, фактически, были определены наиболее симметричные ПКТ из табл.3.1 - ПКТ25 (плоский тетраблок) и ПКТ 18 (линейный тетраблок).

Таблица 3.1. Система порождающих кластеров тетраэдрических структур.

Объединения тетраэдров, определяемые подсистемами корней решетки H_4 и многоугольником Петри политопа {3,3,5}					Pолиэдры пустоты
$A_2 \vee A_1$	$A_1 \vee A_1 \vee A_1$	H_3	$H_2 \vee A_1$		A_{4-1}, D_{4-1}
(6 ₁)	(2)		(10 ₁)	30/11	21
					22
20 					23
19 					24
16 		17 25 	18 30/11(7) 		
11 	12 	13 27 	14 28 	15 30/11(8) 	26
6 	7 30 	8 31 	9 32 	10 30/11(9) 	29
1 	2 34 	3 35 	4 36 	5 30/11(10) 	33 37

Переброска диагонали в ромбе из двух соседних треугольных граней данного ПКТ, приводит к объединению тетраэдров (триангулированному полиэдру), которое является его изомером. Вывод всех топологически неэквивалентных изомеров для данного объединения

тетраэдров (триангулированного полиэдра) рассмотрен в [191]. В таблице 3.1. из всех топологически неэквивалентных изомеров в качестве ПКТ оставлены лишь те, графы которых вкладываются в графы, определяемые указанными выше самодуальными конфигурациями или ассоциированными с ними конструкциями. Так, например, подробно рассмотренные в главе 2 ПКТ 25 (плоский тетраблок) и ПКТ 18 (линейный тетраблок) определяются квартиркой Клейна, в которую вкладывается граф, определяемый конфигурацией Фано. В то же время ПКТ 16 и ПКТ 24 определяются конструкцией “Wada Dessin”, ассоциированной с конфигурацией Фано [228]. Так как ПКТ должны быть связаны и с симметриями политопа {3,3,5}, то (аналогично соображениям, изложенным в главе 2), спирали из ПКТ, с определенными винтовыми осями, могут обладать скрытой (некристаллографической) симметрией.

3.3. Битетраблок – 11-вершинное объединение по грани 2-х тетраблоков

В главе 2 было подробно рассмотрено соответствие тетраэдра ($v=4$) и тетраблока ($v=7$) биплоскостям 2-(4,3,2) и 2-(7,4,2), входящим в особую серию биплоскостей 2-(1+k(k-1)/2, k, 2), $k=3,4,5$ с числом элементов $v= 4, 7, 11$ [229]. При $k=5$, $v=11$ за биплоскостью 2-(7,4,2) следует завершающая серию биплоскость 2-(11,5,2). В главе 2 также была рассмотрена особая серия из 4-х конечных проективных специальных линейных групп $PSL(2,p)$, $p = 3, 7, 11$ и $p = 5$, где $PSL(2,3)$, $PSL(2,7)$, $PSL(2,11)$ и $PSL(2,5)$ – соответственно группы автоморфизмов рассмотренной серии биплоскостей и группа вращений икосаэдра.

Биплоскость 2-(11,5,2) в свою очередь порождает схему блокового дизайна 4-(11,5,1), называемую системой Штайнера $S(4, 5, 11)$. Группой автоморфизмов системы Штайнера 4-(11,5,1) является группа Матье M_{11} - минимальная надгруппа группы $PSL(2,11)$. Как видно из обозначения системы Штайнера, 11 чисел разбиты на блоки из пяти чисел таким образом, что любая четверка чисел встречается только в одном блоке (всего их 66). Поскольку четыре числа можно отождествить с номерами четырех вершин тетраэдра, в работе [79] было показано, что автоморфизмы системы Штайнера, отображающие ее блоки друг в друга, определяют триангулированные 11-вершинники, являющиеся объединением по треугольной грани двух 7-вершинных ПКТ или их изомеров. К таким 11-вершинникам относится и битетраблок - объединение по грани двух конгруэнтных тетраблоков одинакового энантиоморфизма (рис.3.5 α). На рис.3.5 δ, ϑ показано, что переброски диагоналей в ромбах и отбрасывание части ребер, позволяют получить граф рис.3.5 γ , определяющий биплоскость 2-(11,5,2).

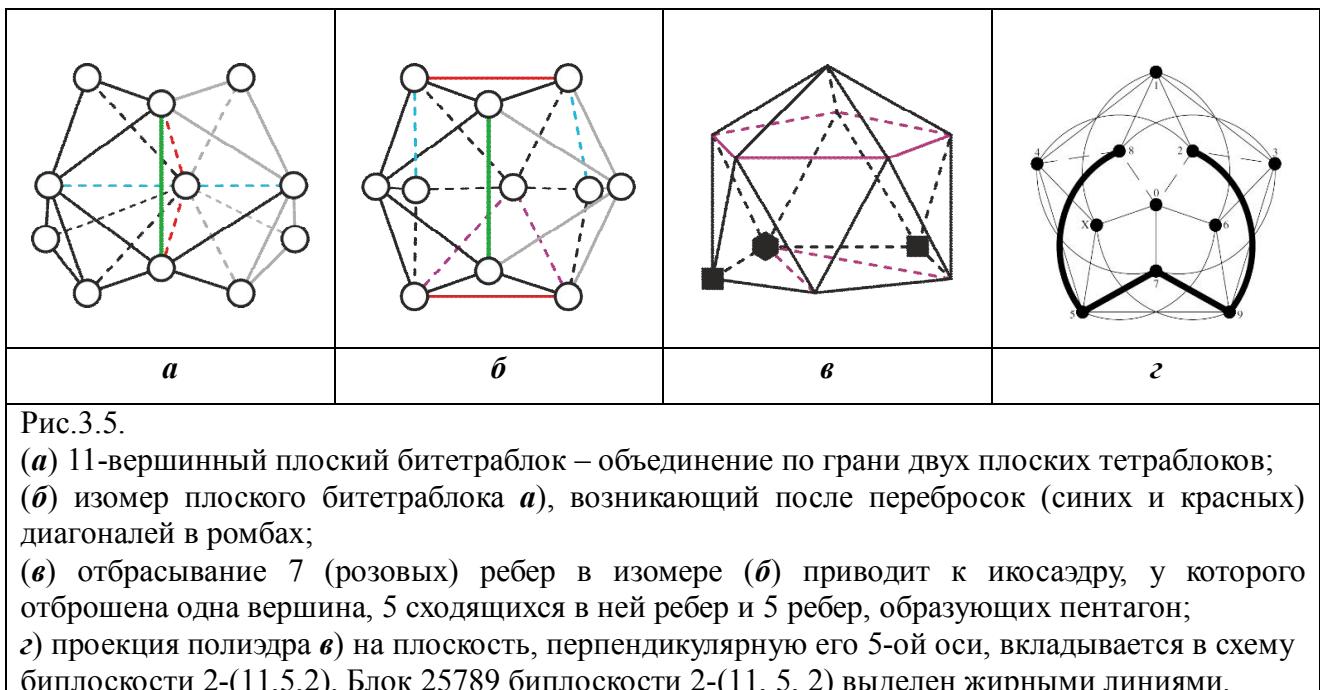


Рис.3.5.

(*а*) 11-вершинный плоский битетраблок – объединение по грани двух плоских тетраблоков; (*б*) изомер плоского битетраблока *а*), возникающий после перебросок (синих и красных) диагоналей в ромбах; (*в*) отбрасывание 7 (розовых) ребер в изомере (*б*) приводит к икосаэдру, у которого отброшена одна вершина, 5 сходящихся в ней ребер и 5 ребер, образующих пентагон; (*г*) проекция полиэдра *в*) на плоскость, перпендикулярную его 5-ой оси, вкладывается в схему биплоскости 2-(11,5,2). Блок 25789 биплоскости 2-(11, 5, 2) выделен жирными линиями.

Аналогичный результат может быть достигнут и для правого битетраблока (рис.3.6*а*). Строение групп $PSL(2,7)$ и $PSL(2,11)$ (рис.1.28) - аналогично (в них по две несопряженных подгруппы О и I, соответственно), поэтому группа симметрии битетраблока может быть определена аналогично группе симметрии тетраблока, подробно рассмотренной в главе 2. Таким образом, группы $PSL(2,p)$, $p = 3, 7, 11$, являющиеся, соответственно, группами автоморфизмов серии биплоскостей $2-(1+k(k-1)/2, k, 2)$, определяют симметрию v -вершинных $v = 1+k(k-1)/2$ триангулированных объединений тетраэдров: $k = 3$ – тетраэдра, $k = 4$ – правого тетраблока, $k = 5$ – правого битетраблока (рис. 3.6*а*).

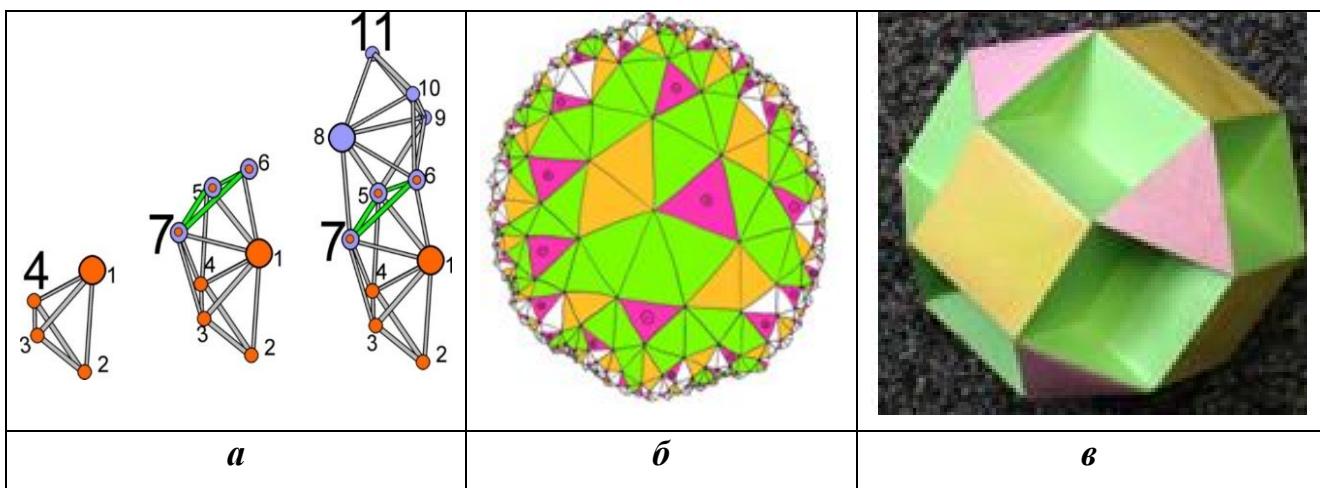


Рис.3.6.

(*а*) тетраэдр, правый тетраблок, правый битетраблок (слева направо); (*б*) раскраска изображенной на рис. 3.2*в* квартини Клейна [230]; (*в*) малый кубикокубооктаэдр [230].

Согласно [230], соответствующая раскраска (рис.3.6б) определяемого группой $PSL(2,7)$ 24-вершинного разбиения сферы с 3-ручками на 56 треугольников (встречающихся по 7 в каждой вершине) позволяет получить малый кубикокубооктаэдр (рис.3.6в). Он обладает 24 вершинами, 48 ребрами и 20 гранями (6 квадратов, 8 треугольников и 6 октагонов), что обеспечивает ему своюственную сфере с 3 ручками Эйлерову характеристику: $24-48+20 = 2-3 \times 2 = -4$. Перестановки его вершин генерируют группу Матье M_{24} , которая в качестве подгруппы содержит группу $PSL(2,7)$, а также группу $PSL(2,11)$ и ее минимальную надгруппу – группу Матье M_{11} . Таким образом, от правого тетраблока, определяемого группой $PSL(2,7)$, можно подняться до надгруппы M_{24} группы $PSL(2,7)$, которая содержит подгруппу M_{11} , содержащую группу $PSL(2,11)$, определяющую правый битетраблок:

$$PSL(2,7) \subset M_{24} \supset M_{11} \supset PSL(2,11) \quad (3.5)$$

3.4. Винтовые оси, определяемые решеткой E_8

Поворотную ось всегда можно представить в виде произведения плоскостей отражения. Пусть группа Вейля W – группа отражений в E^n , порожденная n гиперплоскостями $R_1, \dots, R_j, \dots, R_n$, $R_i^2 = (R_i R_j)^{p_{ij}} = 1$, $p_{ij} = 2, 3, 4, 5, 6$. Пусть h – порядок преобразования Коксетера $w_c = R_1 \dots R_j \dots R_n$, группы W . Тогда $w_c^h = 1$, а собственные значения w_c имеют вид $\exp((2\pi i/h) \cdot m_j)$ и определяют вращения на углы $\frac{2\pi}{h} m_j$. Целые числа m_j – показатели системы Φ (и ее группы W) – определяются соотношениями:

$$m_j + m_{n+1-j} = h, \quad 2 \sum_{j=1}^n m_j = nh = |\Phi|, \quad (3.6)$$

где $m_1 = 1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_j \leq \dots \leq m_n = h-1$, $|\Phi|$ – число корней в Φ , мы будем рассматривать системы лишь при $n \leq 8$. Соотношение (3.6) определяет разбиение Φ на n орбит циклической группы C_h , порожденной вращением на угол $2\pi/h$, каждая из орбит содержит h векторов [139].

Если многочлен $f(x) = f(x_1, \dots, x_n)$ такой, что $wf(x) = f(wx)$, многочлены для которых $f(x) = f(wx)$ для всех $w \in W$, порождают кольцо базисных полиномиальных инвариантов J_1, \dots, J_n группы Вейля W . Степень j -го базисного инварианта равна $m_j + 1$ и называется инвариантом W , порядок W равен произведению ее базисных инвариантов. Например, для икосаэдра $m_1 = 1$,

$m_2=5$, $m_3=9$ и порядок группы I_h икосаэдра равен $2 \cdot 6 \cdot 10 = 120$. Можно показать, что разложение Φ на подсистемы определяется соотношением:

$$|\Phi| = k_j(1+m_j), \quad (3.7)$$

где m_j – показатели Φ или ее подсистем.

Рассмотрим в качестве примера вышеизложенного систему корней F_4 , в которой 24 длинных корня задают вершины политопа $\{3,4,3\}$ с группой Вейля $[3,4,3]$ порядка $2 \cdot 6 \cdot 8 \cdot 12 = 1152$. Показателями F_4 являются 1, 5, 7, 11; следовательно, $h = 1+11 = 5+7 = 12$ и множество из $48 = 2(1+5+7+11) = 4 \cdot 12$ корней F_4 разбивается на 4 орбиты по 12 векторов в каждой. Соответственно, 24 длинных вектора F_4 разбиваются на 2 орбиты по 12 векторов в каждой: $24 = 2 \cdot 12 = 2(1+11)$. Используя другие показатели, получаем следующие возможные разложения

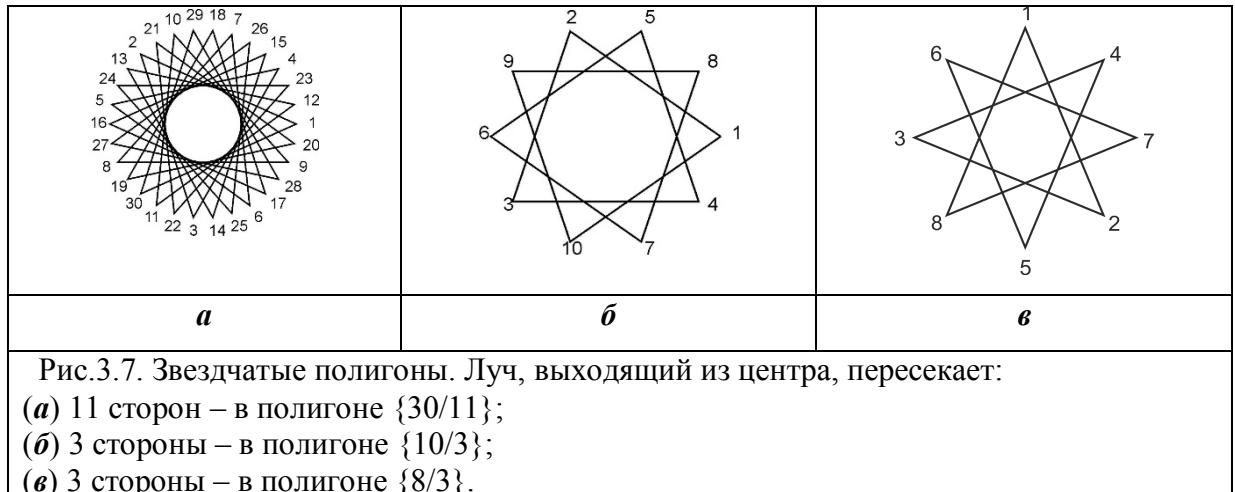
$$24 = k_j(1+m_j), \quad (3.8)$$

где $k_j = 2, 3, 4, 6, 8, 12$; $m_j = 11, 7, 5, 3, 2, 1$.

Разбиению вершин правильного L -угольника на L подмножеств, состоящих из $d+1$ вершины, соответствует ось, которая определяет вращение на угол $2\pi \cdot d/L$. При $1 < d < L/2$ возникает звездчатый L -угольник (рис. 3.7), в котором луч, выходящий из центра и не проходящий через вершину, пересекает d сторон [24]. Кристаллографические и квазикристаллографические поворотные оси ($d=1$) определяются циклическими подгруппами порядка $L = 2, 3, 4, 5, 6, 7\dots$ точечных групп n -мерных решеток [24]. Особую роль среди таких решеток играет решетка корней E_8 .

Симметрию спиральной упаковки полиэдров как единого составного объекта, возникающего при размножении винтовой осью L/d , $1 \leq d < L/2$ "стартового" полиэдра, наиболее полно отображает конструкция расслоенного пространства. В частности, расслоениям Хопфа для решетки E_8 [15, 25, 26] соответствуют глобально-минимальные поверхности, реализующие абсолютные минимумы многомерных функционалов объема. Последнее, делает возможным использование и локальной минимальности при построении высокосимметричных алгебраических конструкций, к которым, в частности, относятся n -мерные платоновы тела – политопы, определяемые (прямо или опосредовано для $n \leq 8$) на сфере S^{n-1} особыми подсистемами векторов решетки E_8 . При построении расслоений локальная минимальность сохраняется, поэтому, переход от 240 векторов первой координационной сферы E_8 ,

образующих политоп Госсета [231], к подструктурам на S^3 и далее к подструктурам в E^3 , позволяет определить симметрийно-возможные в E^3 особые стержневые подструктуры геликоиды с винтовыми осями L/d .

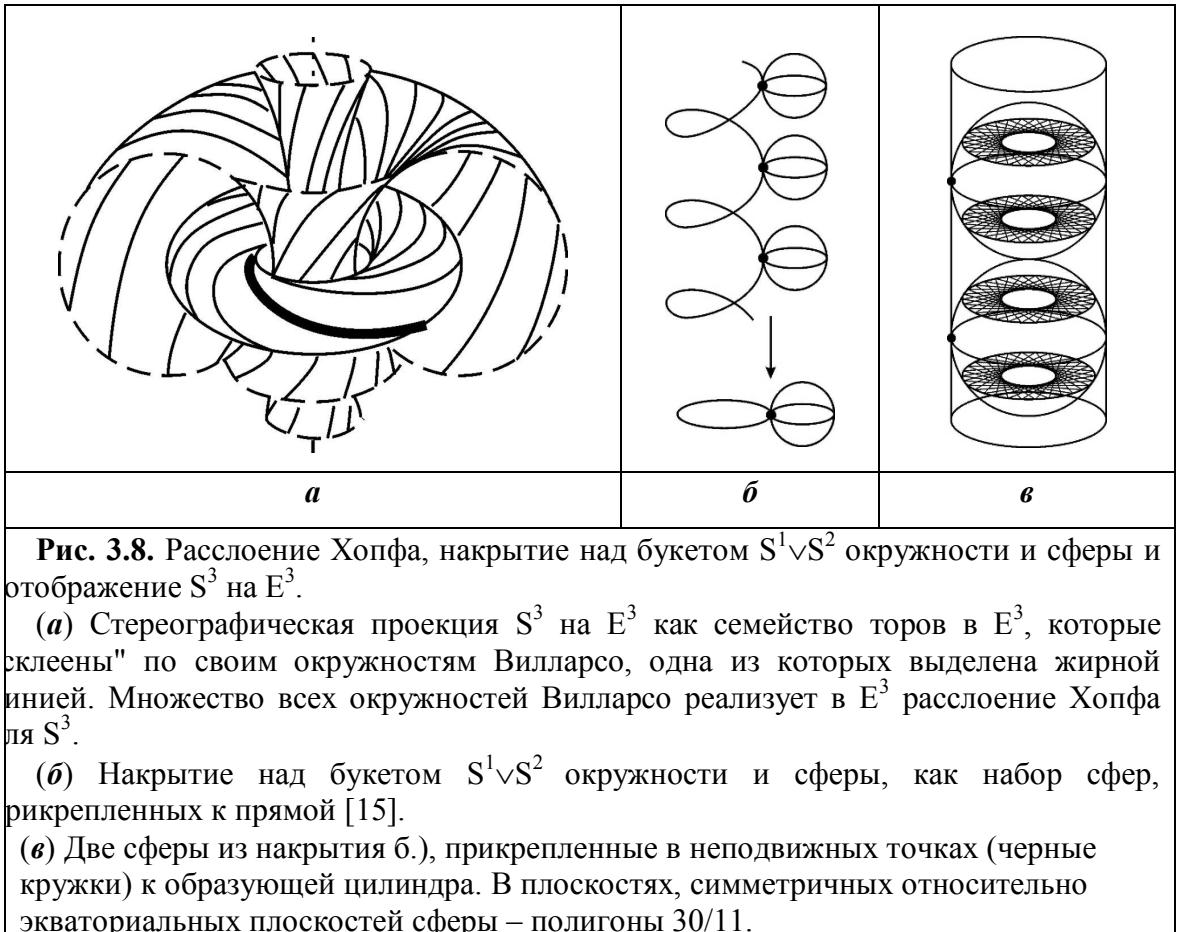


3.4.1. Накрытие над букетом окружности и сферы

Расслоение $S^3 \rightarrow S^2$ (слой S^1) не сводится к прямому произведению $S^2 \times S^1$ (рис. 3.8*a*), поэтому, например, в подходе [12, 232] переход от S^3 к структурам в E^3 реализуется дополнительной операцией "качения" политопа по E^3 . Покажем, что возможен "прямой" переход от подструктур E_8 к подструктурам в E^3 .

Известно [15], что стягивание открытого многообразия (например, области в E^4) к подмножеству меньшей размерности (например, в E^3) описывается гомотопией, обеспечивающей гладкую или кусочно-гладкую деформацию многообразия M в многообразие N . Гомотопность многообразий M и N означает не только изоморфизм их фундаментальных групп, но и переход друг в друга выделенных (неподвижных) точек этих многообразий. Пространство S^3 без окружности S^1 и без точки (или, что идентично пространство E^3 без S^1) гомотопно букету $S^1 \vee S^2$ окружности и сферы (рис.3.8*б*). Универсальное накрытие над букетом $S^1 \vee S^2$ можно представить в виде набора сфер S^2 , прикрепленных к прямой в целочисленных точках $\{x_i, \text{ где } i = 1, 2, \dots, k\}$ (рис. 3.8*б*). Важным инструментом, при такого рода построениях являются использование понятия гомотопии (деформации) отображения многообразий [15]. Поскольку, гомотопия, фактически, описывает гладкую или кусочно-гладкую деформацию одного многообразия в другое, она используется, в частности, при переходе от локально минимальных многообразий, заданных в E^4 , к конструкциям в E^3 при построении расслоений.

При определенных условиях, накладываемых на такого рода отображения, оно называется накрытием.



Геликоидальную (стержневую) подструктуру в E^3 можно рассматривать как подструктуру расслоенного пространства, в котором точки базы, нагруженные сферами, образуют винтовую линию. Если только j точек винтовой линии нагружены сферами, возникает конструкция букета из j сфер, которая (гомотопно) соответствует пространству E^3 , из которого удалены j точек. Когда число "выколотых" (выделенных) в E^3 точек, соответствует числу выделенных, для подструктур политопа Госсета $\{4_21\}$ может возникнуть дискретный вариант расслоения как универсальные накрытия вида $S^3 \rightarrow S_1 \vee S_2$. Любая вкладываемая в E^3 компактная ориентированная поверхность гомеоморфна связной сумме торов [15], поэтому переход от S^3 к универсальному накрытию над $S^1 \vee S^2$ (являющимся, как и S^3 , односвязной поверхностью [15]) возможен только при выделении на S^3 , S^2 и S^1 (как групповых многообразий) торов соответствующих алгебр:

$$S^2 \text{ (слой } S^1) \cong S^3 \supset (S^3 \setminus S^1) \setminus \{x_i\} = E^3 \setminus S^1 \sim S^1 \vee S^2 \leftarrow \sum_i^k S_i^2 \quad (3.9)$$

где $A \setminus B$ – множество A без подмножества B ; \sim символ гомотопической эквивалентности, \rightarrow символ гомоморфного отображения.

Стереографическая проекция S^3 на E^3 представляет собой тороидальные поверхности (рис.3.8a). Катеноид, определяемый одной такой поверхностью, локально-изоморфен геликоиду, который относится к классу минимальных поверхностей, допускающих задание конформных координат. Таким образом, переход (3.8) для S^3 к универсальному накрытию $\sum_i^k S_i^2 \rightarrow S^1 \vee S^2$ можно рассматривать как соответствующий гауссовому отображению S^3 в трубчатую поверхность в E^3 [15]. Заданию на S^3 определенной дискретной подструктуры ("политопа"), соответствует дискретный вариант (3.9), реализующийся при введении так называемой внешней метрики, когда для любых двух точек поверхности геликоида расстояние между ними равно евклидовому расстоянию в E^3 . В этом случае возникают различные классы ограниченных подмножеств (например, спиралеобразных цилиндров над S^1), что позволяет наложить на геликоидальную поверхность в E^3 необходимые граничные условия, обеспечивающие единственность решения и, следовательно, сборку геликоида с использованием полиэдров.

"Политопы" на S^3 могут быть заданы как слои F' ассоциированных с (3.9) расслоений. Пространство E^8 , как вещественное пространство, порожданое алгеброй e_8 , можно рассматривать как максимальный тор, поэтому, расслоением, ассоциированным с (3.9), будут соответствовать реализуемые подторы $T(F')$ указанной алгебры. Ввиду 8-мерности E_8 и возможной двулистности при проектировании в E^4 [15], "политопу" на S^3 должны соответствовать $\frac{8}{\gamma_1} I_n$ векторов из $\{4_{21}\}$, где $\gamma_1=1$ или 2, I_n – инвариант E_8 . Универсальное накрытие из k сфер можно рассматривать как расслоение с базой S^1 и слоем S^2 , для которого отображение I_s/k векторов (I_s тоже инвариант E_8) из $\{4_{21}\}$ на S^2 определяется выделением минимального подтора $T_{min}(F')$ из $T(F')$.

В дискретной реализации (3.9) точкам x_i , к которым прикрепляются сферы S^2 , можно поставить в соответствие k_{js} из I_s корней подсистемы $\{4_{21}\}$. Следовательно, $I_s=k_{js}+k_{js}m_{js}$, где k_{js} – число корней подсистемы Φ_{0s} системы Φ_s , которые мы рассматриваем как нулевые, определяющие неподвижные точки; m_{js} – показатель системы Φ_s . Накрытие $\sum_{i=1}^k S_i \rightarrow S^1 \vee S^2$ состоит из k_{js} сфер, поэтому на экватор каждой из них отобразится целое число $p = \frac{8I_n}{\gamma_1 \gamma_2 k_{js}}$

точек из $\{4_{21}\}$ (отображение на экватор сферы может быть двулистным, поэтому $\gamma_1=1$ или 2), среди которых будет $m_{js}+1$ точка из I_s/k_{js} :

$$\{4_{21}\} \supseteq \frac{8}{\gamma_1} I_n \rightarrow \frac{8I_n}{\gamma_1 \gamma_2 k_{js}} \supseteq \frac{I_s}{k_{js}} = m_{js} + 1. \quad (3.10)$$

При этом точки $\frac{8I_n}{\gamma_1 \gamma_2 k_{js}}$ делят экватор сферы на равные части, а $m_{js}+1$ точка выделяет часть

экватора, которая содержит m_{js} таких частей. В связи с введением внешней метрики, экваторы всех сфер равны, параллельны и эквидистантны, поэтому, выражение, в которое входят только числовые значения инвариантов полупростых алгебр, определяет угол вращения $(360^\circ/L) \cdot d$ винтовой оси геликоида:

$$\frac{8I_n}{\gamma_1 \gamma_2 k_{js}} / m_{js} = \frac{8}{\gamma_1 \gamma_2} \cdot \frac{I_n}{I_s} \cdot \frac{m_{js}+1}{m_{js}} = 2^{\gamma+1} I_n / k_{js} m_{js} = L/d \quad (3.11),$$

где $2^\gamma 8I_n$ и $8I_n$ – число вершин из второй и первой координационной сфер решетки E_8 ; $\gamma=0,1,2$; I_n , $I_s=k_{js}(m_{js}+1)$ - инварианты E_8 , k_{js} – целое, m_{js} – один из показателей, вкладываемых в E_8 подрешеток [63].

В общем случае, в качестве I_n можно брать инварианты E_8 : 8, 12, 14, 18, 20, 24, 30. Перебор всех возможных комбинаций I_n , I_s , m_j и γ позволяет получить все определяемые E_8 оси L/d , которые приведены в табл.3.2. Она содержит все винтовые оси, существующие в подструктурах регулярных политопов [24, 141, 231].

Оси из таблицы 3.2 представлены в виде системы осей на рис. 3.9. Данная система содержит целочисленные кристаллические и квазикристаллические оси порядков 2, 3, 4, 6 и 5, 8, 10, 12, 15, 30, а также нецелочисленные оси, среди которых отмечены оси, не входящие в табл.1 Коксетера [231].

Таблица 3.2. Порядки L/d осей геликоидов Госсета, определяемые по (3.11) при $\gamma_1=2$

I_s	m_{js}	k_{js}	L/d					
			$I_n=30$	$I_n=24$	$I_n=20$	$I_n=18$	$I_n=14$	$I_n=12$
30	1	15	4				28/13	
	2	10	3		2		7/2	
	4	6	5/2	2		3*	7	1
	5	5	12/5		8/3		28/3	
	9	3	20/9	16/7		8/3	28	8
	14	2	15/7	12/5	10/3	9/2	1	12/5*
24	1	12	5	4		3	7/3	2
	2	8	15/2*	3	5/2	9/2*		3*
	3	6	10/3	8/3		2		4
	5	4	3	12/5	2	9/4	7/2	5
	7	3	20/7	16/7		12/5		8
	11	2	30/11	24/11	20/9	18/7		12
20	1	10	6		4		14/5	
	4	4	15/4	3	5/2	9/4		3*
	9	2	10/3	8/3	20/9	2		4
18	1	9	20/3	16/3		4		
	2	6	5	4		3		2
	5	3	4	16/5		12/5		8/3
14	1	7					4	
	6	2					7/3	
12	1	6	10	8		6	14/3	4
	2	4	15/2	6	5	9/2		3
	3	3	20/3	16/3		4		8/3
	5	2	6	24/5	4	18/5		12/5
8	1	4	15	12	10	9		6
	3	2	10	8	20/3	6		4
								8/3

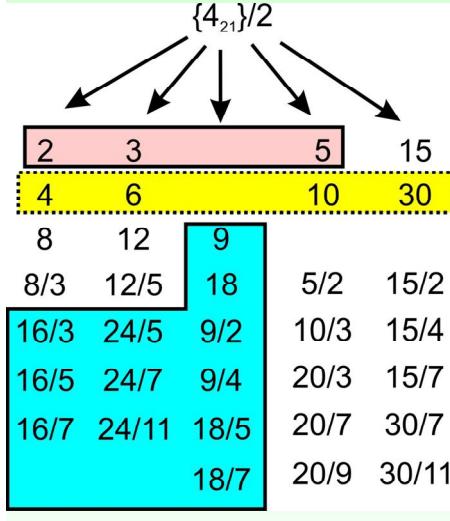


Рис.3.9. Система винтовых осей, определяемых решеткой E_8 .

3.4.2. Примеры геликоидов Госсета с осями L/d

В качестве примера вышеизложенного, определим порядки осей геликоидов Госсета, в "наиболее симметричном" случае: $I_n=30$, система из $I_s=24$ корней определяет вершины политопа $\{3, 4, 3\}$, а именно: состоит из 24 длинных векторов системы F_4 . При $\gamma=2$, получаем $\frac{4I_n}{\gamma I_s} = 5/2$ и, согласно (3.8), возможны следующие разложения I_s :

$$1) 24 = 2(1+11); \quad p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{12}{11} = 30/11 \text{ (рис.3.7a)},$$

тогда $\frac{8}{2} \cdot 30 = 120$ точек, соответствующих 120 корням из $\{4_{21}\}$, по 60 попадают на каждую из

2 сфер универсального накрытия и по 30 отображаются на экватор каждой из них (рис.3.8б). Ось $30/11$ определяет вращение на 132° , а трансляционная компонента геликоида определяется расстоянием между экваторами сфер. Рассматривая вершины $30/11$ как вершины объединения правильных тетраэдров по граням, получаем тетраспираль (рис.2.7а).

$$2) 24 = 3(1+7); \quad p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{8}{7} = 20/7. \text{ Кристаллическим аппроксимантом оси } 20/7 \text{ (вращение}$$

на 126°) можно считать ось 3 (вращение на 120°).

$$3) 24 = 4(1+5); \quad p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{6}{5} = 3.$$

$$4) 24 = 6(1+3); \quad p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{4}{3} = 10/3 \text{ (рис.2.7б)}.$$

Геликоид 10/3 реализуется, например, в биологических структурах [233], при этом его вершины совпадают с четными (или нечетными) вершинами геликоида 20/7. Ось 10/3, осуществляющая вращение на 108° отображает на себя рассмотренные в [224] подструктуры (рис.2.7 σ).

Геликоид 10/3 из 8-вершинников (в форме пентагональных бипирамид со "стоящими" на их гранях тетраэдрами, пентагональные бипирамиды граничат лишь по ребрам) трансформируется в геликоид с винтовой осью 4_1 из полиэдротов Бернала Z8 при переброске одного ребра (диагонали ромба) в каждом 8-вершиннике. Объединение таких спиралей по квадратной решетке приводит к образованию структурного типа шеелита [233]. Одна из таких спиралей 4_1 , образованная граничащими по ребрам полиэдрами Бернала Z8 (т.е. ПКТ 26 из табл3.1), показана на (рис.3.10 a).

5) $24 = 8(2+1)$; $p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{3}{2} = 15/4$. Спираль с осью $15/4$ (вращение на 96°) при деформации образующих ее полиэдротов также может трансформироваться в спираль с кристаллографической осью 4_1 . Пример такой спирали из додекаэдров показан на (рис.3.10 b)

6) $24 = 12(1+1)$; $p/d = \frac{5}{2} \cdot \frac{2}{1} = 5$, что соответствует выводу политопа $\{3,3,5\}$ из политопа $\{3,4,3\}$ по конструкции Госсета [24].

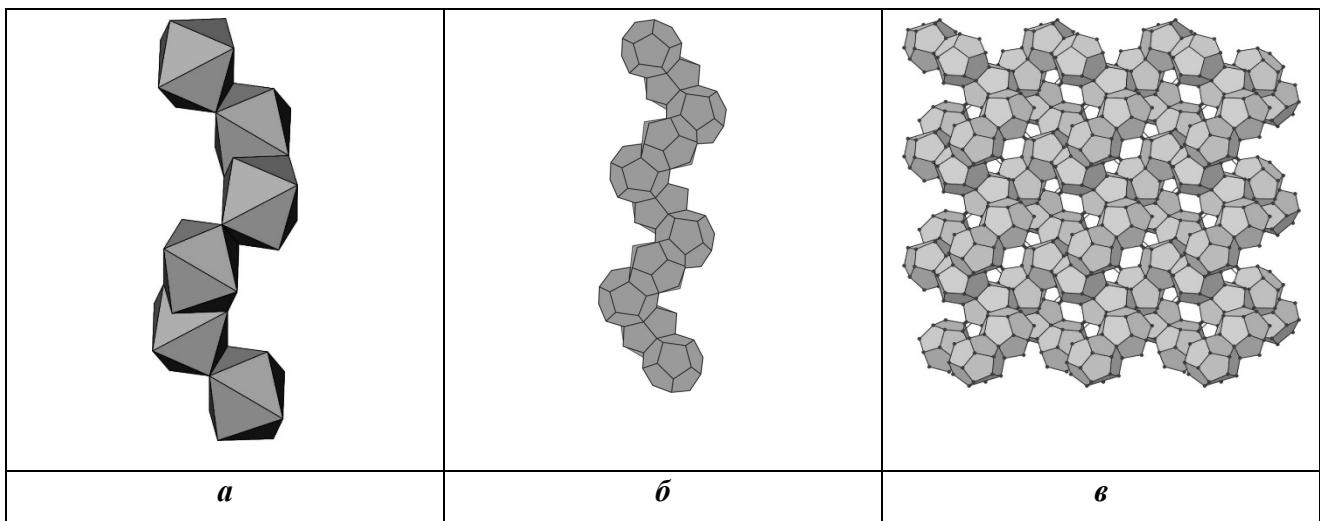


Рис. 3.10. Геликоиды тетраэдрических и тетракоординированных структур.
 (а) Спираль 4_1 из граничащих по ребрам полиэдротов Бернала Z8 в структурном типе шеелита.
 (б) Спираль 4_1 из додекаэдров в структуре клатрата-IX [234].
 (в) Кристаллическая структура кватрата-IX [234].

3.5. Тетраспирали с нецелочисленными винтовыми осями

Определение соотношений связи между упаковками шаров в геликоиды и сборкой геликоидов в плотные упорядоченные структуры можно рассматривать, как этап решения задачи “о роли геометрических факторов в структуре материи” [235]. Касающиеся друг друга шары одного радиуса, центры которых являются вершинами правильного тетраэдра, заполняют 0.7796... объема этого тетраэдра. Это дает границу Роджерса – максимально возможный коэффициент заполнения для любой упаковки трехмерного евклидового пространства E^3 шарами одного радиуса [16]. Двугранный угол правильного тетраэдра 70.53° меньше чем $72^\circ = 360^\circ/5$, поэтому разбиение E^3 на правильные тетраэдры не реализуется. Такое разбиение реализуется в политопе $\{3,3,5\}$, в котором содержится 30-вершинную замкнутую спираль Бордийка-Коксетера из тетраэдров с нецелочисленной осью 30/11 (рис.3.11a). В E^3 эта спираль определяет (бесконечную) тетраспираль из правильных тетраэдров (рис.3.11b).

3.5.1. Тетраспираль 30/11 и спираль 8/3

При проекции в E^3 политопа $\{3,3,5\}$ его многоугольник Петри отображается в спираль на торе, которая имеет 30 вершин на поверхности тора и образована 30 ребрами объединения по грани 30 правильных тетраэдров. Такое объединение тетраэдров будем называть тетраспиралью. Если многоугольником Петри икосаэдра $\{3,5\}$ являются 10 ребер пентагональной антипризмы (рис.3.1a), то многоугольником Петри политопа $\{3,3,5\}$ – замкнутая спираль 30/11, которая обходит 30 вершин, расположенных на поверхности тора, за 11 витков (рис.3.11a). Эти 30 вершин принадлежат и трем 10-вершинным цепочкам 10/1, каждая из которых расположена на окружности Вилларсо тора (рис.3.8a) [143].

Каждая из 120 вершин $\{3,3,5\}$ определяется 4-мерным вектором, которому соответствует кватернион. Координаты (x, y, z, u) вершин одной из тетраспиралей в политопе: $V_n = [a \cdot \exp(i\pi n/30), d \cdot \exp(i\pi n 11/30)]$, где $a = [(1/2)(1+3^{-1/2}5^{-1/4}\cdot\tau^{3/2})]^{1/2}$, $d = [(1/2)(1-3^{-1/2}5^{-1/4}\cdot\tau^{3/2})]^{1/2}$, $n = 0, 2, \dots, 58$ [6, 24]. При проектировании в E^3 координаты вершин тетраспирали принимают вид $V_n = \sqrt{0.27}(\cos(n\Theta), \sin(n\Theta), n/\sqrt{2.7})$, $n = 0, 1, 2, \dots$, где $\Theta = \arccos(-2/3) \approx 131.81^\circ$, что близко к $\Theta = 132^\circ = 360^\circ \cdot 11/30^\circ$ [236].

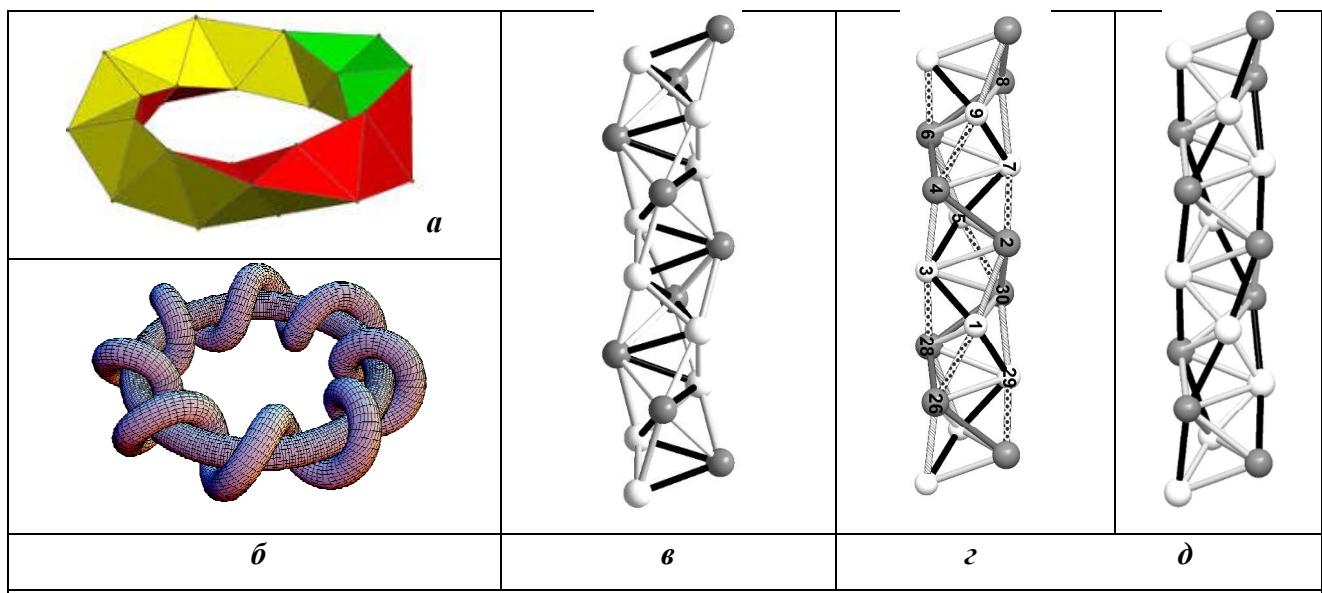


Рис. 3.11.

(**a**) Замкнутая в политопе {3,3,5} в тор тетраспираль из 30 тетраэдров; (**б**) обвивание спирали **a** в политопе {3,3,5}; (**в**) Спираль 30/11 (орбита ребер винтовой оси 30/11) в тетраспирали показана черным; (**г**) Спирали 15/4 (орбиты ребер винтовой оси 15/4) в тетраспирали показаны черным и серым. Винтовая ось 15/4 отображает заштрихованные ребра в заштрихованные, а пятнистые в пятнистые; (**д**) Три спирали 10/1 (орбиты ребер винтовой оси 10/1) в тетраспирали показаны черным

Симметрию многоугольника Петри политопа {3,3,5} – спирали 30/11 отображает циклическая группа 30-го порядка 30/11 (винтовая ось 30/11); все степени образующего элемента h (поворота на $360^\circ \cdot 11/30 = 132^\circ$) которой представлены в табл. 3.3. Элементы вида h^n , $n = 1, 3, 5 \dots 15$; h^{3n} , $n = 1, 2, \dots, 10$ и h^{5n} , $n = 1, 2, \dots, 6$ образуют циклические подгруппы 15-, 10- и 6-го порядков группы C_{30} .

Таблица 3.3

Степени образующего элемента (поворота на $360^\circ \cdot 11/30 = 132^\circ$) циклической группы 30/11.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
132	-96	36	168	-60	72	-156	-24	108	-120	12	144	-84	48	180
$\frac{30}{11}$	$-\frac{15}{4}$	$\frac{10}{1}$	$\frac{15}{7}$	$-\frac{6}{1}$	$\frac{5}{1}$	$-\frac{30}{13}$	$-\frac{15}{1}$	$\frac{10}{3}$	$-\frac{3}{1}$	$\frac{30}{1}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{30}{7}$	$\frac{15}{2}$	$\frac{2}{1}$

16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
-48	84	-144	-12	120	-108	24	156	-72	60	-168	-36	96	-132	0
$-\frac{15}{2}$	$\frac{30}{7}$	$-\frac{5}{2}$	$-\frac{30}{1}$	$\frac{3}{1}$	$-\frac{10}{3}$	$\frac{15}{1}$	$\frac{30}{13}$	$-\frac{5}{1}$	$\frac{6}{1}$	$-\frac{15}{7}$	$-\frac{10}{1}$	$\frac{15}{4}$	$-\frac{30}{11}$	1

Сpirаль 30/11, ребра которой в тетраспирали принадлежат трем тетраэдрам, будем обозначать {30/11(30)}. Ребра тетраспирали, принадлежащие двум тетраэдрам, образуют две спирали 15/4, хиральность которых противоположна 30/11. Ребра, принадлежащие только одному тетраэдру, образуют три спирали 10/1(рис.3.11*в*, *г*, *д*). Вершинами спиралей 15/4 являются взятые через одну вершины спиралей 30/11, поэтому они принадлежат геликоиду $30/22 = -30/8 = -15/4$, где $-15/4$ означает вращение на 96° в направлении противоположном вращению спиралей 30/11 на 132° . Аналогично, при взятии вершин спиралей 15/4 через одну получаем спираль $15/8 = 15/7$ (вращение на 168°). Ребро геликоида 15/7 соединяет центры двух икосаэдров, граничащих по общей грани. Наличие циклических групп 5-го и 6-го порядков, определяет распределение 30 вершин геликоида 30/11 по пяти 6-вершинным геликоидам 15/7, каждому из которых принадлежат по 2 вершины из каждого геликоида 10/1.

Политоп {3,3,5} строится по конструкции Госсета из 24-вершинного политопа {3,4,3}, состоящего из 24 октаэдров. Для этого каждое из 96 ребер политопа {3,4,3} центрируется, что приводит к 96-вершинному “политопу” $sn\{-3,4,3\}$ из 24 кубооктаэдров (рис.3.12*а*), объединяемых по треугольным граням. Сдвиг этих точек от середин ребер октаэдров в положение, делящее ребро в пропорции золотого сечения, приводит к трансформации каждого кубооктаэдра в икосаэдр. Центрировка каждого из икосаэдров добавляет 24 вершины к имеющимся 96 и приводит к образованию 120 вершин политопа {3,3,5}, распределенных по 4-м замкнутым в тор 30-вершинным тетраспиралям (рис.3.11*а*). В политопах {3,4,3} и $sn\{-3,4,3\}$ существует винтовая ось 8/3, реализующая вращение на угол $g=135^\circ$, которое представляет собой порождающий элемент циклической группы 8-го порядка. Каждая из тетраспиралей является объединением 3-х спиралей 10/1, каждая из которых, (в силу построения политопа {3,3,5} по конструкции Госсета из политопа {3,4,3}) должна содержать спираль 8/3 и 2 не принадлежащие спирали 8/3 вершины.

Из конструкции Госсета следует, что группе 8/3 с порождающим элементом g должно соответствовать замкнутое подмножество из 8 элементов группы 30/11, помещенных в табл.3.3. Действительно, $(2\pi \cdot 11/30)^{11} = 2\pi/30$ и, при условии минимально возможной разницы в углах вращения, справедливо соотношение:

$$h^{n \pmod{11}} \leftrightarrow g^m, \quad n = 1, 2, \dots, 30, \quad (3.12)$$

определенное 8 степеней порождающего элемента h группы 30/11: **1**, **2**, **14 = 3+11**, **15 = 4+11**, **16 = 5+11**, **28 = 6+22**, **29 = 7+22**, **30 = 8+22**, которые отличаются от соответствующих поворотов g^m , $m = 1, 2, \dots, 8$ на 3, 6, 3, 0, 3, 6, 3, 0 градусов (табл.3.3). В группе 30/11 подмножество таких степеней h можно рассматривать как $8/3 \pmod{2\pi/30} = 8/3 \pmod{12^\circ}$ – циклическую подгруппу

8-го порядка по модулю $2\pi/30$. “Умножение” элементов такой “группы” будет происходить следующим образом: например, $(30/11)^2 \cdot (30/11)^{16} = (30/11)^{18} = -144^\circ \cong -132^\circ$ $(\text{mod } 12^\circ) = (30/11)^{29} = (30/11)^{18+11}$. Очевидно, что по $\text{mod } 2\pi/30$ первые 8 степеней образующего элемента h группы $30/11$ также можно соотнести с $8/3(\text{mod } 2\pi/30)$. Сопоставление элементов групп $8/3$, $C_8(\text{mod } 2\pi/30)$ и первых 8-ми степеней h представлено в табл.3.4.

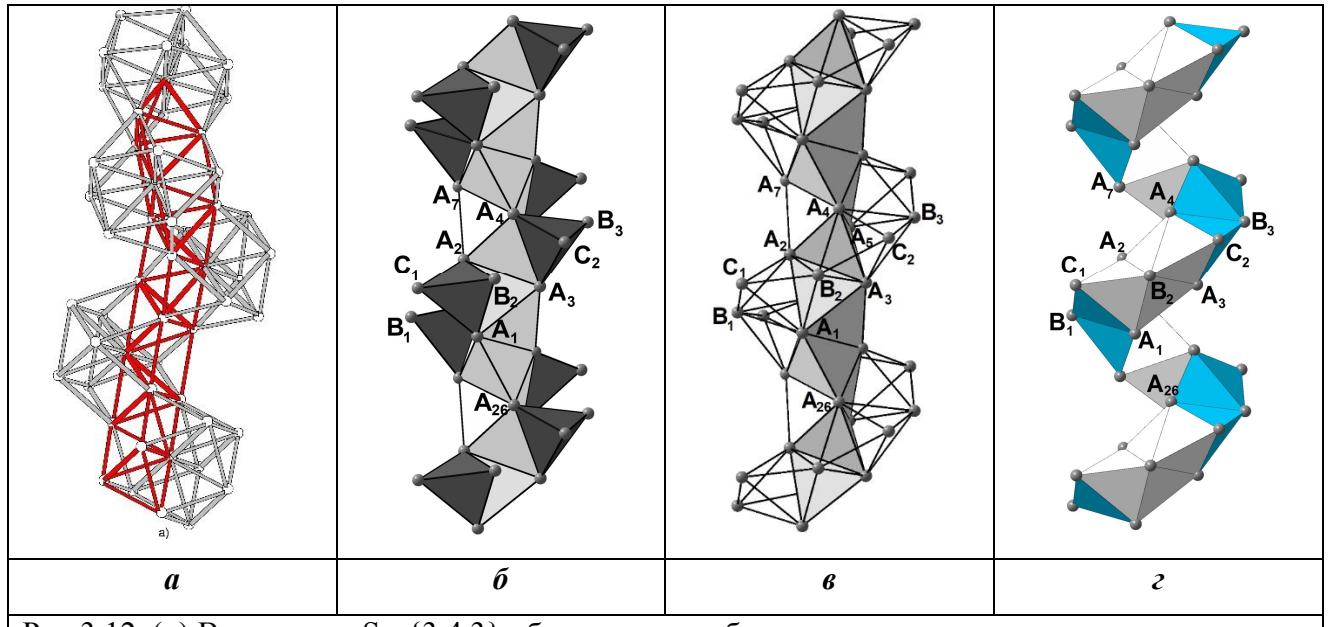


Рис.3.12. (а) В политопе $\text{Sn}-\{3,4,3\}$ объединение кубооктаэдров по треугольным граням определяет выделенную красным спираль, которую образуют чередующиеся тетраэдры и полуоктаэдры. Из каждого кубооктаэдра в спираль входит полуоктаэдр с двумя тетраэдрами, стоящими на его гранях;
(б) Расширение тетраспирали правильными (темно-серыми) тетраэдрами, имеющими с ней только общие ребра;
(в) Спираль из объединяемых по грани тетраблоков обивает тетраспираль;
(г) Обвивающая спираль (в) как объединение синих и белых тетраблоков.

Таблица 3.4. Сопоставление групп $8/3$, $C_8(\text{mod } 2\pi/30)$ и первых 8-ми степеней образующего элемента (поворота на $2\pi \cdot 11/30 = 132^\circ$) циклической группы $30/11$.

8/3	1	2	3	4	5	6	7	8
	135	-90	45	180	-45	90	-135	0
	8/3	-4/1	8/1	2/1	-8/1	4/1	-8/3	1
$8/3(\text{mod } 2\pi/30)$	1	2	14=3+11	15=4+11	16=5+11	28=6+22	29=7+22	30=8+22
	132	-96	48	180	-48	96	-132	0
30/11	1	2	3	4	5	6	7	8
	132	-96	36	168	-60	72	-156	-24

Вершины спирали 30/11 принадлежат 3-м спиралям 10/1, каждой из которых соответствует одна из строк в табл.3.5. В таком представлении ось 30/11 осуществляет движение между строками таблицы в порядке возрастания номеров, например: 30–1–2–3–4–...–28–29–30. Под действием $C_8(\text{mod } 12^\circ)$ из нулевой (она же 30-ая) вершины, выбранной в качестве стартовой, могут быть получены вершины **30, 1, 2, 14, 15, 16, 28, 29**, принадлежащие геликоиду $8/3 \pmod{12^\circ}$. Из стартовых вершин 11 и 22, которые (в плоскости вращения) совпадают с нулевой по модулю $12^\circ = (2\pi \cdot 11/30)^{11}$, могут быть получены вершины **11*, 12*, 13*, 25*, 26*, 27*, 9*, 10* и 22', 23', 24', 6', 7', 8', 20', 21'**, соответственно. Таким образом, в каждом из 3-х геликоидов 10/1 могут быть выделены 8 вершин, принадлежащих геликоиду $8/3 \pmod{12^\circ}$. При этом среди 10 столбцов табл.3.5, каждый из которых соответствует одному треугольнику 30-вершинного тетрагеликса, наряду со столбцами из вершин одного сорта (**n, n*, n' или n**) будут и столбцы с вершинами двух сортов: **n и n, n* и n', n' и n**.

Таблица.3.5. Распределение вершин 4-х сортов 3-х геликоидов 10/1 по 3-м строкам

<u>30</u>	3	6'	9*	12*	15	18	21'	24'	27*		
1	4	7'	10*	13*	16	19	<u>22'</u>	25*	28		
2	5	8'	<u>11*</u>	14		17	20'	23'	26*	29	

В табл.3.6 показано максимально близкое к табл.3.5 расположение её 30 вершин по 11 столбцам, при котором в каждом столбце находятся 3 или 2 вершины одного сорта:

Таблица 3.6. Распределение 30 вершин тороидальной тетраспирали по 3-м спиралям 10/1(строкам) и 11 виткам (столбцам) из вершин одного сорта.

	3	6'	9*	12*	15	18	21'	24'	27*	<u>30</u>	
	4	7'	10*	13*	16	19	<u>22'</u>		25*	28	1
	5	8'	<u>11*</u>		14	17	20'	23'	26*	29	2

Таким образом, определяемое конструкцией Госсета и конкретизируемое табл.3.6 распределение 30 вершин тетраспирали по 11 виткам:

$$30 = [3(n) + 3(n') + 3(n^*) + 2(n^*)] \cup [3(n) + 3(n) + 3(n') + 2(n')] \cup [3(n^*) + 3(n) + 2(n)] \quad (3.13)$$

реализуется в развертке спирали 30/11 приведенной в [143].

Разрезание тора, на поверхности которого находятся 30 вершин замкнутой тетраспиралы по плоскости, проходящей через 3 вершины первого столбца табл.3.4, приводит к цилиндуру. На боковой поверхности такого цилиндра будут располагаться 27 вершин, а на окружностях верхнего и нижнего оснований – по 3 вершины, отождествление которых приводит к исходному тору. Табл.3.4 определяет разбиение 33 вершин этого цилиндра на 3 подмножества {30/11(11)} по 11 вершин в каждом:

$$33 = [\tilde{3} + 3+3+2] \cup [3+3+3+2] \cup [3+3+2+\tilde{3}], \quad (3.14),$$

где символом $\tilde{3}$ обозначаются отождествляемые тройки вершин. Каждое 11-вершинное подмножество $3+3+3+2$ представляет собой объединение двух правых (левых) тетраблоков Δ и $h^4\Delta$:

$$\Delta \cup h^4\Delta = (3+1+h^43) \cup h^4(3+1+h^43) = 3+1+h^43 + h^41 + h^83, \quad (3.15),$$

где “стартовый” треугольник (содержащий вершины 1-го столбца табл.3.4) обозначен цифрой 3; h - образующий элемент группы 30/11. Тетраблок Δ однозначно соответствует 7-вершинному объединению двух тетраэдров и полуоктаэдра между ними (рис.3.12a) при разбиении полуоктаэдра на 2 тетраэдра.

Переход по строке табл.3.1 осуществляется элементарно-подобными преобразованиями, в частности, дисклиническим квадруплетом q (или 2π -дисклинацией), действие, которого иллюстрирует, например, переброска диагонали в "ромбе" из двух треугольных граней в Δ . Действительно, замена в таком "ромбе" короткой диагонали на длинную меняет число сходящихся в его вершинах ребер на ± 1 , что эквивалентно проведению $\mp 2\pi/5$ дисклинациии через каждую из этих вершин. Итак, заменив короткую диагональ на длинную и потребовав равенства ребер, получим ПКТ24 - одношапочный октаэдр (объединение по грани октаэдра и тетраэдра).

3.5.2. Обвивание тетраспиралы 30/ 11 спиралью 15/4 из тетраэдров

Пусть A_1A_3 - ребро спирали $(15/4)A_1$, $A_4=(15/4)A_2$ - вершина второй спирали $15/4$, $A_2=10_1A_1$, $A_1A_2A_3$ – треугольник в тетрагеликсе $\{30/11(30)\}$. Тогда не принадлежащая $\{30/11(30)\}$ (но принадлежащая политопу $\{3,3,5\}$) вершина B_2 тетраэдра $B_2A_1A_2A_3$ принадлежит спирали $15/4$ B_2 . Вершина C_2 тетраэдра $A_3A_4C_2B_2$ также принадлежит спирали $15/4B_2$. Тетраэдры $B_2A_1A_2C_1$, $B_2A_1A_2A_3$, $B_2A_2A_3A_4$ и $B_2A_3A_4C_2$ образуют тетраблок Δ' с центром в B_2 (рис.3.12б,в). В политопе $\{3,3,5\}$ объединение 5-ти правильных тетраэдров у

одного ребра образует невозможную в E^3 пентагональную бипирамиду, в которой ось равна ребру. При размножении осью $15/4$ тетраблока Δ' в политопе $\{3,3,5\}$ (рис.3.13) возникает объединение 60 тетраэдров $(15/4)\Delta'$, которое не содержит пентагональных бипирамид (рис.3.12 *в,г*). Это означает, что такое 60-вершинное (т.е. содержащее половину вершин политопа!) объединение тетраэдров с минимальными потерями симметрии может быть отображено в E^3 :

$$\{3, 3, 5\} \supset (15/4)\Delta' \supset \{30/11(30)\} \supset \Delta \cup h^4\Delta \supset \Delta, \quad (3.16)$$

где $\Delta' \not\subset \{30/11(30)\}$.

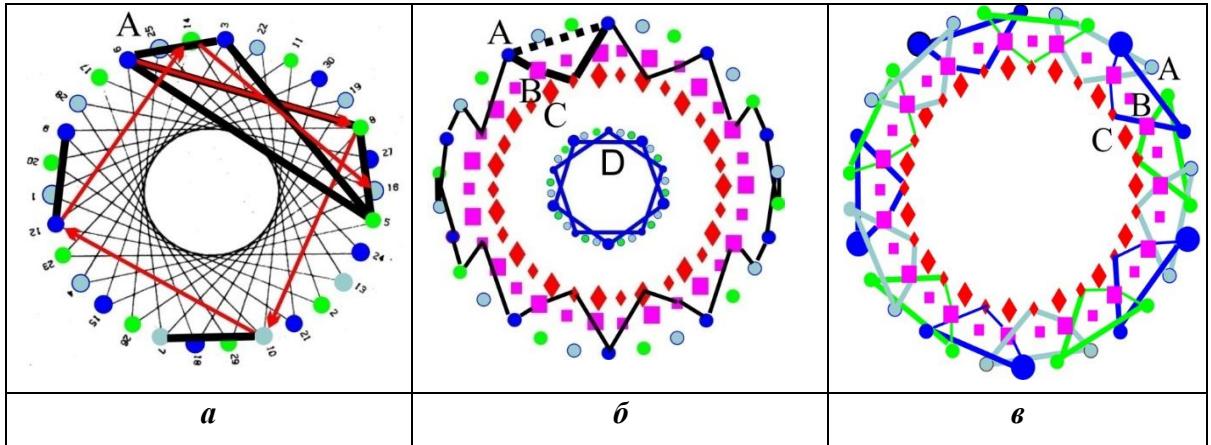


Рис.3.13.

(а) Проекция спирали $30/11$ на плоскость. Вершины спиралей $10/1$ показаны зеленым, синим и голубым. Красные стрелки показывают действие оси $15/4$. Ребра спирали Коксетера-Бердийка показаны жирными черными отрезками.

(б) Вершины политопа $\{3,3,5\}$ проектируются в 4 концентрических 30-вершинника A, B, C, D (рис.13-6А из работы [24, р.249]); вершины A и D совпадают с вершинами спиралей Коксетера-Бердийка, вершины B и C показаны розовым и красным. «Несимметричная» спираль Коксетера-Бердийка показана черными линиями, жирные черные отрезки – ребра одного тетраэдра.

(в) Проекция 15 непересекающихся тетраэдров из $\{3,3,5\}$, 60 вершин которых охватывают все вершины A , четные B и нечетные C .

Спираль Коксетера - Бердийка из правильных тетраэдров в политопе $\{3,3,5\}$ определяется как орбита тетраэдров оси $30/11$, переводящая друг в друга 4 тетраэдра линейного тетраблока $\Delta=\Delta_1$. Четвертой степенью оси $30/11$ является ось $15/7$, поэтому, в политопе спираль из тетраблоков Δ_1 генерируется 11-вершинником $\Delta_1(15/7)$. В E^3 в соответствующей спирали, генерируемой $\Delta_1((15/7)')$, трансляции вдоль оси нет. Расчетами показано [216], что при малых искажениях ребер тетраэдра (2-3%) трансляция в спирали Коксетера - Бердийка возникает именно на 8 тетраэдрах (первый и девятый тетраэдры

становятся трансляционно эквивалентными), т.е. спираль разбивается на трансляционно – эквивалентные 11-вершинные объединения двух (слегка искаженных) тетраблоков. Действительно, искажения ребер тетраэдров приводят к возникновению вместо винтовой оси $15/7$ (поворот на 168^0) винтовой оси 2_1 (поворот на 180^0), квадратом которой является трансляция. Таким образом, (3.16) определяет и ось $m_0/p_0 = 15/7$ в политопе $\{3,3,5\}$, и соответствующую ей ось $m'/p' = 2_1$ в E^3 . Аналогично, оси $m_0/p_0 = 15/4$ (поворот на 96^0) из политопа $\{3,3,5\}$ ставится в соответствие ось $m'/p' = 40/11$ (поворот на 99^0) в E^3 .

В общем случае возможно генерирование одной и той же спирали двумя различными 11-вершинниками, например, $\Delta_1(40/11)$ и $\Delta_3(40/11)$ -объединение двух плоских тетраблоков Δ_3 . В рассматриваемом случае это определяется тем, что в политопе $\{3,3,5\}$ существует 60-вершинная орбита оси $15/4$ из 15 изолированных тетраэдров. При выпрямлении в E^3 возникает спираль $40/11$ из изолированных правильных тетраэдров, обвивающая спираль Коксетера - Бердийка из слегка деформированных тетраэдров. Каждый из изолированных тетраэдров может быть достроен либо до Δ_1 , либо до Δ_3 . Очевидно, что генерируемая таким образом спираль, в силу дополнительной симметрии $\Delta_1(40/11)=\Delta_3(40/11)$, должна быть более устойчивой. Например, при сохранении спирали в целом, малые воздействия могут приводить к переходу от разбиения спирали на тетраблоки Δ_3 к ее разбиению на тетраблоки Δ_1 (рис.3.12 *в,г*).

3.5.3. Спираль из одношапочных октаэдров

Тетраблок Δ может быть трансформирован в элементарно-подобный ему одношапочный октаэдр Δ' . Трансформация дисклинационным квадруплетом q каждого Δ' в геликоиде $15/4\Delta'$ приводит к геликоиду 4_1 из граничащих по граням одношапочным октаэдрам. Геликоид представляет собой “ГЦК-аппроксимант геликоида $15/4\Delta'$ ” и является объединением геликоида $4_1\{3,4\}$ из (граничащих по ребрам) правильных октаэдров (рис.3.14*а*) и стержня $4_1\{3,3\}$ с симметрией $4_2/mmc$ из (граничащих по ребрам) правильных тетраэдров (рис.3.14*б*). При этом геликоид $4_1\{3,4\}$ обвивает стержень $4_1\{3,3\}$, трансляция в котором составляет половину трансляции в геликоиде. Квадратная решетка из непересекающихся геликоидов $4_1(\{3,4\} \cup \{3,3\})$ охватывает все вершины ГЦК [16] подобно тому, как все вершины шахматной доски могут быть охвачены только половиной черных (белых) клеток (рис.3.14 *в,г*). Отсутствие пересечения стержней обеспечивает сохранение их упаковки, а охват ими всех вершин структуры обеспечивает плотную упаковку всей структуры.

3.6. ГЦК - решетка как квадратная решетка непересекающихся трансформированных тетраэдрических спиралей

Различные варианты сборки стержней в кристаллические структуры подробно рассмотрены в [140]. Понижение симметрии геликоида может быть достигнуто либо его трансформацией в геликоид из полиэдров, которые будут элементарно-подобными Δ'' и не являться объединениями тетраэдров; либо понижением симметрии тетраэдров в геликоиде.

Если в каждом октаэдре ГЦК провести диагональ d и оставить лишь прилегающую к стержню из тетраэдров четверть октаэдра $\{3,4\}/4$ (то есть тетраэдр, в котором только d не принадлежит стержню), то получим обивающий стержень геликоид $4_1(\{3,4\}/4)$ из таких нерегулярных тетраэдров (рис.3.15 a, δ). Объединение тетраэдров геликоида $4_1(\{3,4\}/4)$ и стержня $4_1\{3,3\}$ можно определить как "ГЦК-аппроксимант геликоида Бернала". Действительно, такой аппроксимант можно получить, если в каждом из трех геликоидов 10/1 геликоида Бернала все нечетные ребра увеличить в $\sqrt{2}$ раз, а длины всех остальных ребер геликоида сохранить. Квадратная решетка (с периодом $1/\sqrt{2}$) из изолированных друг от друга ГЦК-аппроксимантов геликоидов Бернала также охватывает все вершины ГЦК (рис.3.15 δ), и при отбрасывании ребер d определяет кристалл SiS_2 [237]:

$$\text{ГЦК} = P4_1(\{3,4\} \cup \{3,3\}) \supset 4_1(\{3,4\} \cup \{3,3\}) \supset 4_1(\{3,4\}/4 \cup \{3,3\}) \supset 4_2/\text{mmc}\{3,3\}. \quad (3.17)$$

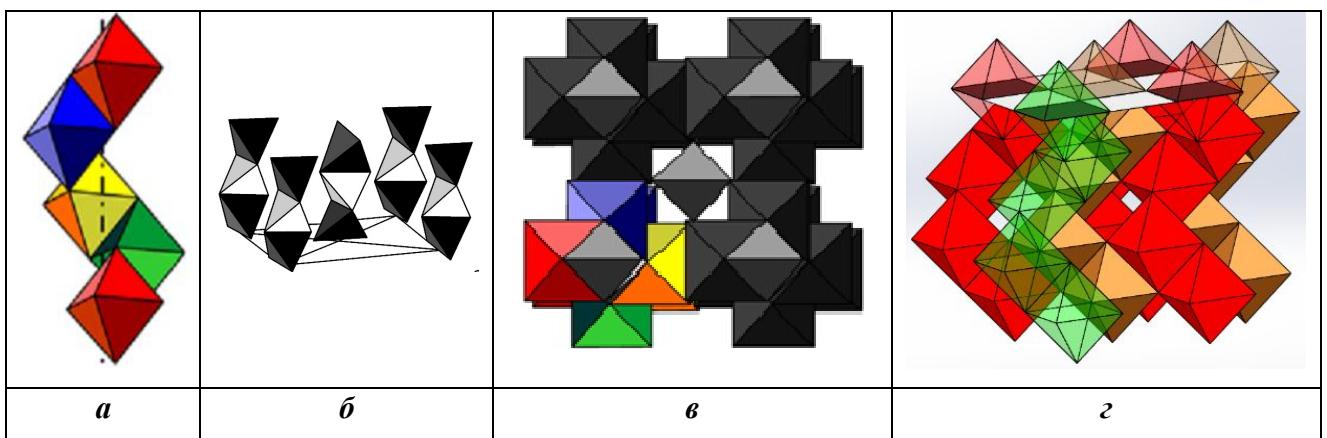
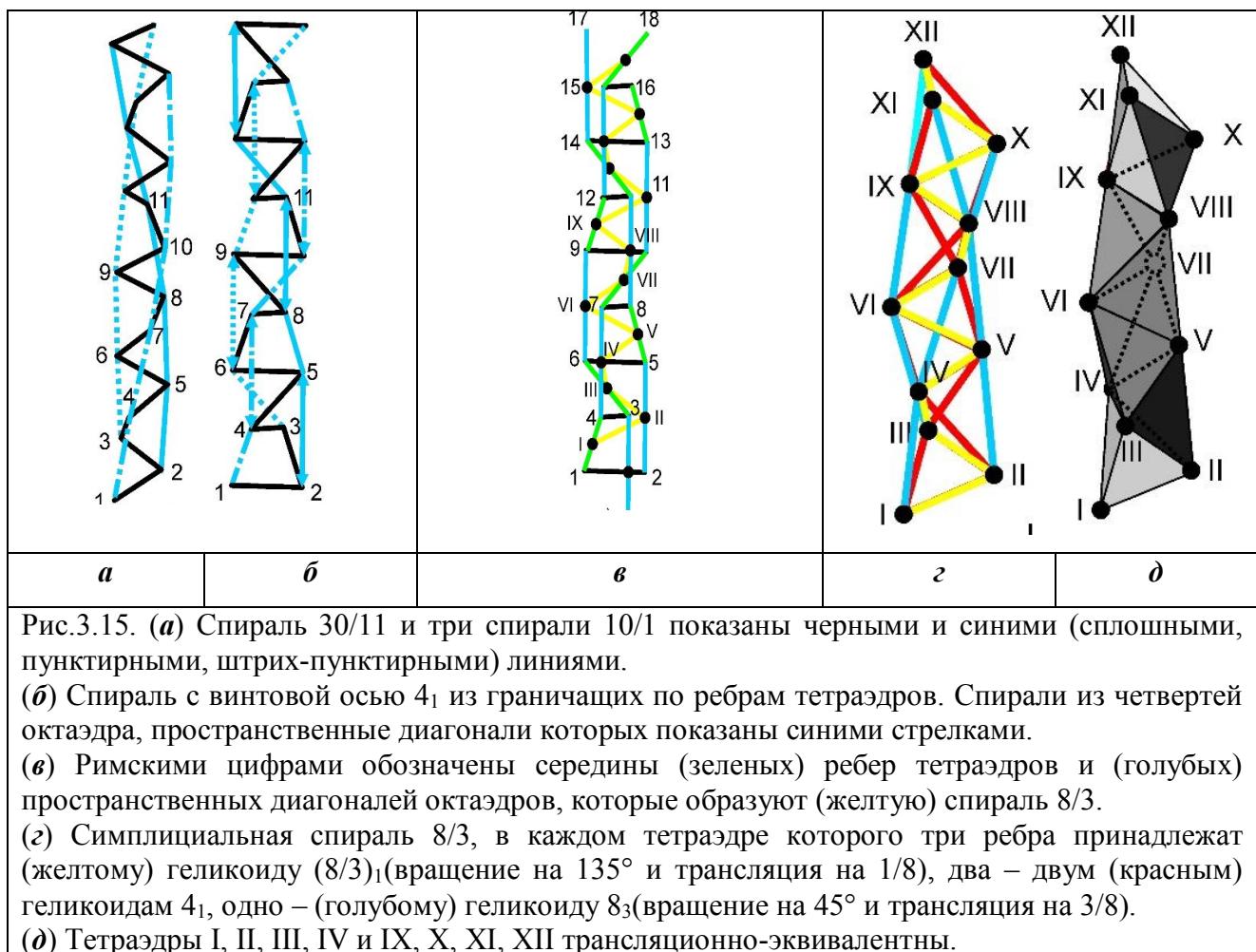


Рис.3.14.

- (a) Спираль 4_1 из граничащих по ребрам октаэдров в ГЦК-решетке.
- (δ) Структура типа SiS_2 (рис.64 из [237]). Непересекающиеся стержни из тетраэдров охватывают все вершины ГЦК.
- (ε) ГЦК-решетка как квадратная решетка **непересекающихся** спиралей, показанных на рис.(δ). В каждой спирали стержни из тетраэдрических пустот изображены светлым по центрам геликоидов.
- (γ) ГЦК-решетка разбивается на непересекающиеся спиральные объединения октаэдров вдоль оси 4_1 : три красные и одну полупрозрачную зеленую (ее цвет изменен с красного на зеленый для ясности рисунка). Спирали охватывают все вершины ГЦК-решетки, но не имеют общих вершин (атомов), подобно образующейся в поперечном сечении кубической решетки шахматной доске, все вершины которой охватываются только половиной черных квадратов.

Соотношения (3.17) отображают понижение (преобразованием q) коэффициента упаковки 0.7740 стержня из политопа до 0.7405 в трансформированном стержне. Это обеспечивает возможность решетчатой сборки трансформированных стержней (рис.3.14) при сохранении коэффициента упаковки 0.7405 (плотнейшей шаровой решетчатой упаковки) во всем пространстве E^3 .



Все вершины ГЦК-аппроксиманта геликоида Бернала охватываются и геликоидом 4_1d , и геликоидом 4_1r (где r - ребро, соединяющее d и 4^3_1d), поэтому объединение середин ребер геликоидов 4_1d и 4_1r однозначно соответствует вершинам геликоида Бернала и принадлежит геликоиду $8/3$. Это означает, что тетраэдры в геликоиде Бернала можно деформировать так, что его вершины совпадут с объединение середин ребер геликоидов 4_1d и 4_1r (рис.3.15в) и возникнет симплексиальный геликоид $8/3$. Таким образом, и геликоид Бернала, и его ГЦК-аппроксимант можно рассматривать как два отображения симплексиального геликоида $8/3$, которые определяют возможность кристаллической или некристаллической сборки плотноупакованных структур.

Если в тетраблоке Δ общими с тетрагеликсом являются 3 тетраэдра (то есть лишь одна вершина не принадлежит тетрагеликсу), то такой тетраблок обозначим Δ^* . Размножение в политопе $\{3,3,5\}$ такого объединения осью $15/4$ приводит к геликоиду $15/4 \cdot \Delta^*$ – геликоиду Коксетера с обвивающим его геликоидом $15/4$ из граничащих по вершинам тетраэдров. Понижение симметрии тетраэдров в геликоиде $15/4 \cdot \Delta^*$ достигается его заменой геликоидом $15/4 \cdot \Delta^*_0$ из политопа $\text{Sn-}\{3,4,3\}_0$. Рассмотрим в следующем разделе геликоид $15/4 \cdot \{30/11(5+1)\}_{30}$ из особого политопа $\text{Sn-}\{3,4,3\}_{30}$, которому в E^3 должна соответствовать плотная упаковка шаров двух радиусов, при возможных длинах ребер тетраэдров 0.911, 0.9528, 1 и 1.10.

3.7. Кристалл β -Mn как пример сборки геликоидов Госсета

В металлической плотноупакованной структуре β -Mn реализуются кристаллические аппроксиманты геликоида Бернала из тетраэдров $30/11$, и геликоида $15/4$ из икосаэдров [215]. Кристаллические аппроксиманты геликоидов $15/4$ из додекаэдров реализуются в структуре газогидратов (клатратов), при соединении додекаэдров по двум граням (рис.3.10 *б,в*). В геликоиде $15/4$ из икосаэдров n -ий икосаэдр имеет по одной общей грани с $n-2$ и $n+2$ икосаэдрами; так что, если в таком геликоиде оставить все четные (нечетные) икосаэдры, остается геликоид из (нерегулярных) икосаэдров, центры которых образуют геликоид $15/7$ – вращение на 168° и трансляция вдоль оси. Вершины геликоида $15/7$ можно рассматривать как вершины геликоида $15/4$, взятые через одну; при этом кристаллическим аппроксимантом геликоида $15/7$ является ось 2_1 ($30/15$). Действительно, винтовая ось 4_1 всегда содержит винтовую ось 2_1 , поэтому в кристалле геликоид 2_1 из икосаэдров можно рассматривать как аппроксимант геликоида $15/7$ из икосаэдров. Такому геликоиду соответствует случай $\gamma=2$, $I_h=I_s=30=2(1+14)$: $p/d = \frac{4}{2} \cdot \frac{15}{14} = 15/7$. При $\gamma=1$ инварианты $I_h=I_s=30=3(9+1)$ определяют ось $p/d = \frac{8}{2} \cdot \frac{10}{9} = 40/9$, которая реализуется в подструктуре политопа $\{240\}$ – алмаза в S^3 [6].

При ребре равном 2.6 Å (и минимальным ребром 2.36 Å), принадлежащий $15/4 \cdot \{30/11(5+1)\}_{30}$ геликоид $\{30/11\}_{30}$ определяет упаковку тетраэдров в симплексиальном стержне кубического кристалла β -Mn, в котором винтовые оси 4_1 являются и осями стержней (рис.3.16). Этот кристалл (группа $P4_132$) состоит из атомов Mn двух типов, которые имеют различное окружение; его бинарным аналогом являются Fe_2Re_3 , Ru_2Mg_3 и др. [215].

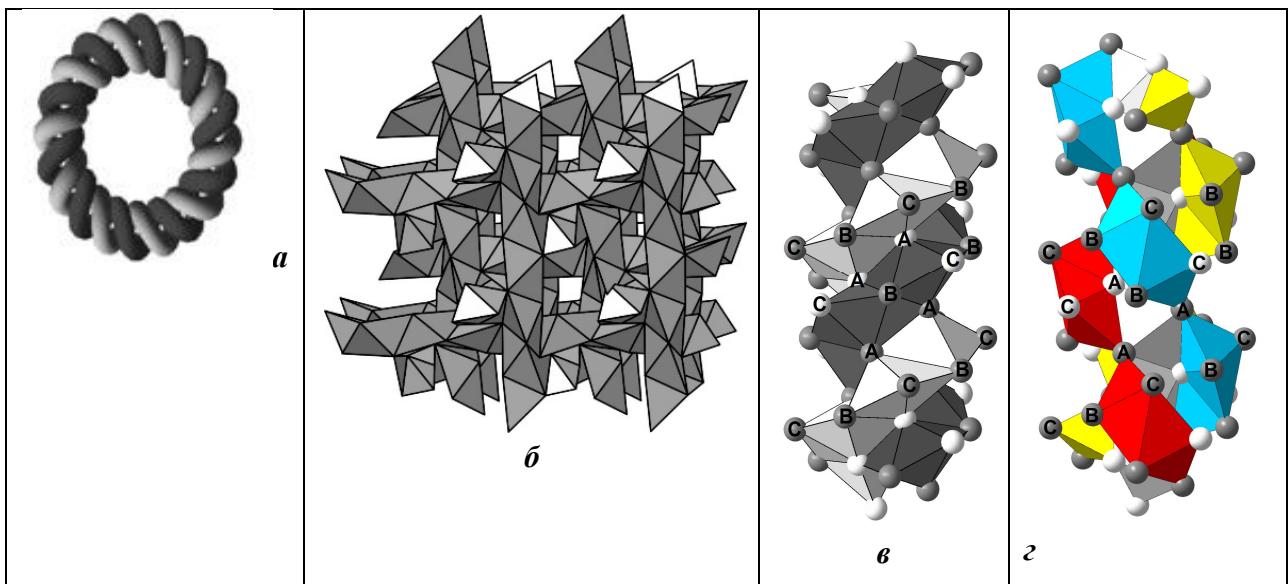


Рис.3.16. (а) Замкнутая в политопе $\{3,3,5\}$ в тор тетраспираль обвивается двойной спиралью из тетраэдров. Плотноупакованный кубический кристалл β -Mn [215], рассматриваемый как квадратная решетка: (б) из периодических тетраспиралей (с локальными осями $8/3$); (в) из двойных спиралей, обвивающих тетраспиралю (б) и состоящих из тетраблоков, объединенных по граням; (г) из тройных спиралей, обвивающих тетраспиралю (б) и состоящих из тетраблоков, объединенных по вершинам. Белые и серые шары - ионы марганца в разных зарядовых состояниях.

Минимальный трансляционно-повторяющийся фрагмент стержня β -Mn состоит из 8 неправильных тетраэдров, которые разделены на два типа. Тетраэдры каждого типа связаны винтовой осью 4_1 , а вершины стержня “в среднем” связаны осью $8/3$ [166]. Наличие в стержне “оси” $8/3$ позволило рассматривать структуру β -Mn как кристаллический аппроксимант октагонального квазикристалла [166].

Вышеизложенным особенностям β -Mn соответствует первоначальное отображение геликоида $15/4 \cdot \{30/11(6+1)\}_{30}$ не в расширенный тетрагеликс (из правильных тетраэдров), а в расширенный симплексиальный геликоид $8/3$ с осью 4_1 (рис.3.15 $г, д$). Затем (сохраняющие ось 4_1) деформации тетраэдров приводят к геликоиду, конгруэнтные копии которого уже могут быть собраны по тетрагональному закону в кристалл β -Mn (рис.3.16). Пересечение плотноупакованных стержней минимально, что обеспечивает достигающий 0.73 коэффициент упаковки.

3.8. «Магический» кластер палладия Pd₅₆₁ как подструктура декорированного политопа {3,3,5}

В решетку E₈, определяемую [16] как "продолжение" ГЦК решетки в E⁸, вкладывается и 120-вершинный политоп {3,3,5} (4-мерный аналог икосаэдра) и 6600 вершинный "политоп" {3,3,5}_{λ=5}, возникающий при размещении λ-1=4 вершин на каждом ребре {3,3,5}_{λ=5}, так что его ячейками являются тетраэдры и 12-вершинники полиэдры Фриауфа (FP) с 4 треугольными и 4 гексагональными гранями (рис.3.17a,б,в). Множество центров гексагональных граней всех FP из {3,3,5}_{λ=5} образует "политоп" {6000}, который возникает как множество всех середин ребер "политопа" {3000} [5]. Политоп {3000} в свою очередь образуется при размещении двух вершин на каждом ребре политопа {5,3,3} – 4^x мерного аналога додекаэдра, дуального к {3,3,5}. 12600-вершинное объединение политопов {3,3,5}_{λ=5} и {{5,3,3}_{λ=3}}_{λ=2} вкладывается в решетку E₈, при этом "икосаэдр" I_{λ=5} из исходного политопа {3,3,5} содержит 561 вершину (рис. 3.17a).

В икосаэдрическом объединении I_λ каждый тетраэдр {3,3}_λ (рис.3.17в) граничит с тремя соседними по плоскостям отражений, каждая из которых является и плоскостью отражений для прослойки ГПУ_λ. Последнее означает, что каждый тетраэдр {3,3}_λ ограничен в I_λ тремя прослойками ГПУ_λ, а всего I_λ содержит 30 таких прослоек. Только при λ≤5 все вершины {3,3}_λ охватываются объединением трех ГПУ_λ (рис.3.17г) и, следовательно, справедливы соотношения: I_{λ≤5}=20·{3,3}_{λ≤5}= 30·ГПУ_{λ≤5}, выделяющие 561-атомный кластер как особый в ряду гигантских нанокластеров I_λ [238].

Гигантский нанокластер I_{λ=5} можно определить как икосаэдрический двойник и ГЦК, и ГПУ, который топологически соответствует локально минимальному многообразию. Можно показать, что I_{λ=5} определяется расслоением Хопфа для 3-ей координационной сферы E₈, содержащей 6720=560·12 вершин [16].

Решетка E₈ содержит и ОЦК решетку в которой общее число вершин в пределах 23-ей координационной сферы равно 561 [16]. Такой кластер, обозначаемый нами, как ОЦК₅₆₁, можно рассматривать как упаковку центрированных ромбододекаэдров ОЦК решетки (RD_{OЦК}). Прослойки ГПУ_{λ=5} также представляют собой упаковку 14-вершинных центрированных кластеров (RD_{λ=5}), для каждого из которых возможна трансформация в RD_{OЦК}. На симметрийном уровне эта трансформация определяется теми же конструкциями алгебраической геометрии, что и трансформации кластеров, показанные на рис.3.17. Так как

$RDo_{\text{ЦК}}$ является параллелоэдром ОЦК, а ГПУ $_{\lambda=5}$ – принадлежит $I_{\lambda=5}$, то (на симметрийном уровне) это определяет возможность мартенситного перехода ОЦК–ГЦК.

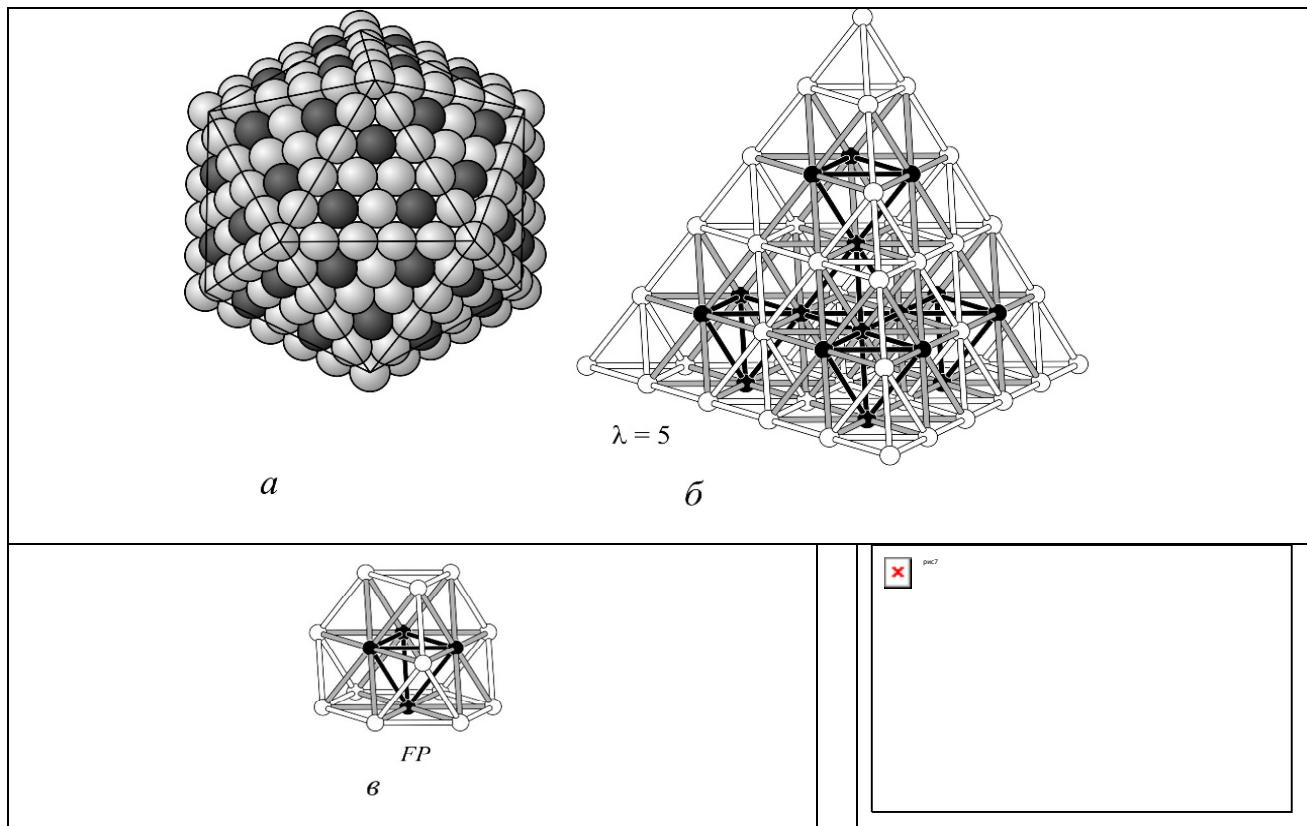


Рис. 3.17. Икосаэдрический двойник и ГЦК, и ГПУ.

- (*a*) 561-атомный кластер Pd₅₆₁ [238].
- (*б*) 56-вершинный декорированный тетраэдр из 12600 вершинного политопа – декорированного политопа {3,3,5}.
- (*в*) составляющий кластер а) декорированный Фриауф-полиэдр.
- (*г*) образование прослойки ГПУ при двойниковании тетраэдров (*б*). Вершины центрированного 14-вершинного кластера из ГПУ выделены жирными кружками.

Реализацию таких симметрийных соотношений можно связать с наблюдаемыми при мартенситных превращениях процессамиnanoструктурирования, определяемыми переходом от ГЦК к промежуточным фазам типа $I_{\lambda=5}$. На языке алгебраических конструкций это соответствуют переходу от тривиального главного расслоения к нетривиальному, а от него к ассоциированным с главным. Возникающие при этом фазы представляют собой объединения нанокластеров, размеры и особенности строения которых определяются этими ассоциированными расслоениями. В итоге, цепочка расслоений позволяет определить необходимое объединение фрагментов различных решёток и их взаимные превращения при мартенситных переходах: ГЦК $\rightarrow I_{\lambda=5}$ (фаза, являющаяся одновременно и ГЦК, и ГПУ) \rightarrow ГПУ (содержащая 14-вершинники, комбинаторно-топологически эквивалентные ромбододекаэдру из ОЦК) \rightarrow ОЦК.

3.9. Заключение

Тетраблоки могут быть собраны и в более крупные объединения, чем спиральные упаковки. Действительно, центры тетраэдров в регулярном икосаэдре образуют додекаэдр, через вершины которого проходит замкнутый граф Гамильтона (рис.3.18*a*). Если в этом графе 2 ребра отбросить, а одно добавить, то получим незамкнутую цепь из 5 четверок вершин (рис.3.18*b*). Сопоставив каждой вершине центр тетраэдра, получим объединение 5 тетраблоков: 4-х плоских и одного правого, образующих икосаэдр со щелями (рис.3.18*c*). Щели образуются в силу того, что правильный икосаэдр собирается не из правильных тетраэдров, а из тетраэдров с двумя разными длинами ребер.

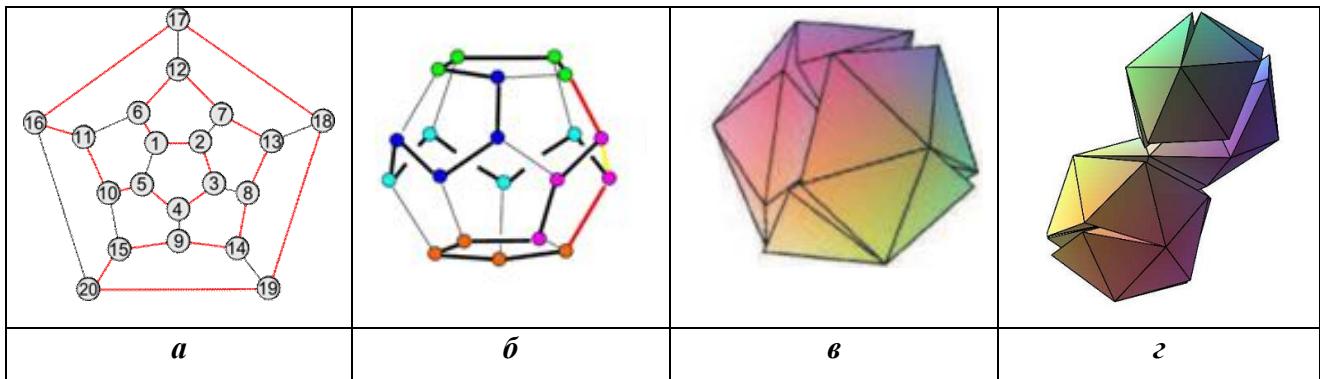


Рис.3.18.

- (*a*) Граф Гамильтона додекаэдра (красная линия) проходит через все вершины.
- (*б*) Отбрасывание двух красных ребер и добавление желтого ребра приводит к незамкнутой цепи из 5-ти четверок вершин: зеленой, синей, голубой, фиолетовой, оранжевой.
- (*в*) Сопоставление каждой четверке вершин в (*б*) центров входящих в тетраблок тетраэдров определяет цепь 5 тетраблоков, свернутую в икосаэдр со щелями (рис.7 [198]).
- (*г*) Сворачивание цепи тетраблоков в объединение двух икосаэдров со щелями (рис.8 [198]).

Из икосаэдров со щелями затем может быть собрана спиральная упаковка (рис.3.18*г*). Объединение правильных тетраэдров по граням иерархически можно представить в виде последовательности: тетраэдр – тетраблок – битетраблок – цепь тетраблоков (табл.3.7).

Таблица 3.7. Объединения правильных тетраэдров по граням как геометрические реализации комбинаторных конструкций.

Объединение правильных тетраэдров по граням	Тетраэдр	Тетраблок	Объединение 2 тетраблоков во фрагмент спирали	Сворачивание цепочки 5 тетраблоков в икосаэдр со щелями
Число тетраэдров	1	4	8	20
Число вершин	4	7	11	23
Варианты объединения		правый Δ_1 , левый Δ_2 , плоский Δ_3	с винтовой осью m/p (4).	6 вариантов размыкания графа Гамильтона додекаэдра.
Комбинаторная структура, определяющая объединение тетраэдров	биплоскость 2-(4,3,2)	биплоскость 2-(7,4,2), сверхотображение 2-(7,3,1) в квартику Клейна	биплоскость 2-(11,5,2) система Штайнера S(4, 5, 11)	рубик-икосаэдрическая конструкция группы Матье M ₁₂
Группа комбинаторной структуры, порядок группы	PSL(2,3), 12	PSL(2,7), 168	PSL(2,11), 660 Группа Матье M ₁₁ ; 7920	PSL(2,5), 60 PSL(2,11), 660 M ₁₂ , 95040

По результатам настоящей главы можно сделать следующие выводы:

1. Подсистемы корневых векторов решетки H₄, соответствующей вершинам политопа {3,3,5}, позволяют задать объединения тетраэдров и элементарно-подобных им триангулированных полиэдров, графы которых определяются конструкциями проективной (комбинаторной) геометрии. Количество вершин в таких кластерах, являющихся независимыми порождающими кластерами тетраэдрических структур (ПКТ), может быть от 4-х до 10-ти. Обоснования ограничения в 10 вершин:

- для каждого из таких кластеров существует конфигурация n₃ с n вершинами, n = 4, 7, 8, 9, 10 конечной проективной геометрии (11-вершинный триангулированный полиэдр уже не является независимым, и может быть представлен объединением по грани тетраэдра и 10-вершинника);
- триангуляция тора с любым числом вершин может быть сведена к комбинации триангуляций тора с числом вершин, не превышающим 10;
- полиэдры пустоты Бернала имеют число вершин, не больше 10.

Всего существует 37 ПКТ; они образуют “систему ПКТ”, которая содержит все полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала, в том числе линейный и плоский варианты тетраблока.

2. Решетка E₈ определяет особый класс винтовых осей, включающий оси кристаллографические (порядков 2, 3, 4, 6), квазикристаллографические (порядков 5, 8, 10, 12, 15, 30) и нецелочисленные (порядков m/p = 2^{γ+1} I_n/k_{js}m_{js}). Здесь 2^γ8I_n и 8I_n – число вершин из второй и первой координационных сфер решетки E₈; γ = 0, 1, 2; I_n, I_s = k_{js}(m_{js}+1) –

инварианты E_8 , k_{js} – целое, m_{js} – один из показателей подрешеток, вкладываемых в E_8). Решетка E_8 содержит нецелочисленные оси m/p (с вращением на угол $360^\circ \cdot p/m$). Среди этой совокупности, помимо ранее известных осей $30/11, 30/7, 30/13, 10/1, 10/3, 15/4, 8/3$ и др., есть также оси $40/11, 18/5$ и др. – впервые они определены в настоящей работе.

3. Существуют теоретико-групповые соотношения связи между симметриями $30/11$ и $8/3$, определяющими плотнейшую линейную упаковку: правильных тетраэдров в иррациональную спираль Бердийка-Коксетера и тетраэдров с минимально-возможными искажениями ($\sim 2\%$) длин ребер в периодическую спираль Бердийка-Коксетера.
4. В политопе $\{3,3,5\}$ может быть выделена 60-вершинная спираль с осью $15/4$, которая состоит из 15 тетраблоков (объединенных по граням), обвивает замкнутую в тор спираль Бердийка-Коксетера и содержит все ее 30 вершин. Две такие спирали (с одной и той же осью $15/4$), обвивающие спираль Бердийка-Коксетера, содержат 90 вершин; эти 90 вершин принадлежат также трем спиралям с осью $5/1$ из тетраблоков, объединенных по вершинам.
5. Плотноупакованный кубический кристалл β -Mn можно рассматривать в качестве разных вариантов решеток: (a) из периодических спиралей Бердийка-Коксетера (с локальными осями $8/3$); (б) из двойных спиралей, обвивающих спирали Бердийка-Коксетера и состоящих из тетраблоков, объединенных по граням; (в) из тройных спиралей, обвивающих спирали Бердийка-Коксетера и состоящих из тетраблоков, объединенных по вершинам.
6. Объединение по грани двух тетраблоков в битетраблок реализует соотношения связи между группой Матье M_{24} и ее подгруппами $PSL_2(7)$ и $PSL_2(11)$, определяющими симметрию 7-вершинного тетраблока и 11-вершинного битетраблока. Рост симметрии объединений правильных тетраэдров по граням отвечает последовательности: тетраэдр – тетраблок – битетраблок – спираль из тетраблоков.
7. ПКТ генерирует спиральную упаковку, ось m/p которой может определяться решеткой E_8 . Определенный набор ПКТ позволяет задать спирали, из которых могут быть собраны плотноупакованные тетраэдрические (металлические) структуры, являющиеся объединением таких спиралей. Высокая симметрия данного класса структур определяется возможностью их вложения в решетку E_8 . В частности, плотнейшая кубическая упаковка (ГЦК-решетка) является квадратной решеткой спиралей из 7-вершинных ПКТ – одношапочных октаэдров, которые не имеют общих вершин. Фазовые переходы между структурами, которые собираются из ПКТ, определяются взаимными трансформациями этих ПКТ – перебросками диагоналей в “ромбах”, образованных парами соседних треугольных граней ПКТ.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [33-35, 37, 38, 41, 45, 46, 50-56, 58-61, 63-65, 67-69, 75, 79-83, 85-88, 90, 98, 99, 104, 115, 125, 126, 128-130, 239].

Глава 4. Система порождающих кластеров упорядоченных алмазоподобных структур

4.1. Параллелоэдр алмаза как евклидова реализация конфигурации Фано 7_3

В данном разделе будет показано, что невыпуклый параллелоэдр алмаза может быть определен, как евклидова реализация конфигурации Фано 7_3 [33, 42, 43]. Среди подконфигураций плоскости $\text{PG}(2,q)$ возможны и такие, граф инцидентности которых представим лишь нерегулярной картой, осуществляющей разбиение с различным числом гексагонов у каждой вершины. Такой нерегулярной картой является, в частности, карта, получаемая из регулярной карты $\{6,3\}_{b,c}$ ($N_2 = b^2 + bc + c^2$, $N_1 = 3N_2$, $N_0 = 2N_2$) на торе. Удалив из нее $r = 3$ ребра, получим на сфере нерегулярную карту $\{6,3\}_{b,c}^3$ со свойственной сфере эйлеровой характеристикой:

$$\chi(\{6,3\}_{b,c}^3) = 2N_2 - 3(N_2 - 1) + (N_2 - 1) = 2, \quad (4.1)$$

где $2N_2$, $3(N_2 - 1)$ и $(N_2 - 1)$ – число вершин, ребер и гексациклов $\{6,3\}_{b,c}^3$. Если вершины карты $\{6,3\}_{b,c}^3$ соединены ρ внутренними ребрами, “протыкающими” сферу, то для такой карты $\chi = 2 - \rho$, и будем обозначать ее $\{6,3\}_{q,1}^{3,\rho}$.

Например, объединение D_3^+ двух конгруэнтных ГЦК–решеток D_3 , структуру алмаза можно рассматривать как регулярный бихроматический граф $\Gamma(D_3^+)$ бесконечного порядка степени 4 и обхвата 6. Ребра этого графа не пересекаются, поэтому общий подграф $\Gamma(D_3^+)$ и $\Gamma(2(q^2+q+1), q+1, 6)$ должен совпасть с нерегулярной картой $\{6,3\}_{q,1}^{3,\rho}$. При таком подходе кластер алмаза является и объектом евклидовой геометрии, и $\text{PG}(2,q)$ – конечной проективной геометрии. Следовательно, кластер алмаза соотносится с графом

$$(\Gamma(2(q^2+q+1), q+1, 6)) \cap \Gamma(D_3^+) \leftrightarrow \{6,3\}_{q,1}^{3,\rho}. \quad (4.2)$$

Наличие не более 4–х связей в вершине кластера реализуется при $q = 2, 3$; поэтому, в соответствии с (4.2), можно утверждать, что кластеры алмаза с графиками $\{6,3\}_{q,1}^{3,\rho}$, $q = 2, 3$ обладают “оставшейся” от $\text{PG}(2,q)$ и в E^3 дополнительной “сверхевклидовой” симметрией, адекватное отображение которой возможно лишь на уровне некристаллографических групп.

Граф инцидентности однозначно определяет PG(2,2) или самодуальную конфигурацию Фано $(7_3, 7_3) = 7_3$. Поэтому карта $\{6,3\}_{2,1}^3$ ($\rho = 0$) определяет ее самодуальную подконфигурацию, также состоящую из 7 точек и 7 прямых, но с различным числом (3 и 2) прямых, проходящих через 4 и 3 точки и, соответственно, с другим числом точек (3 и 2) на 4-х и 3-х прямых. Если PG(2,2) соответствует “нормальная” таблица инцидентности, содержащая 21 зачерненный кружок (21 ребро в карте $\{6,3\}_{2,1}$), то такой подконфигурации будет соответствовать таблица с 18 зачерненными кружками (18 ребер в карте $\{6,3\}_{2,1}^3$) и 3 белыми кружками, соответствующими 3-м удаленным из $\{6,3\}_{2,1}$ ребрам (рис. 4.1 a, b, \mathfrak{b}).

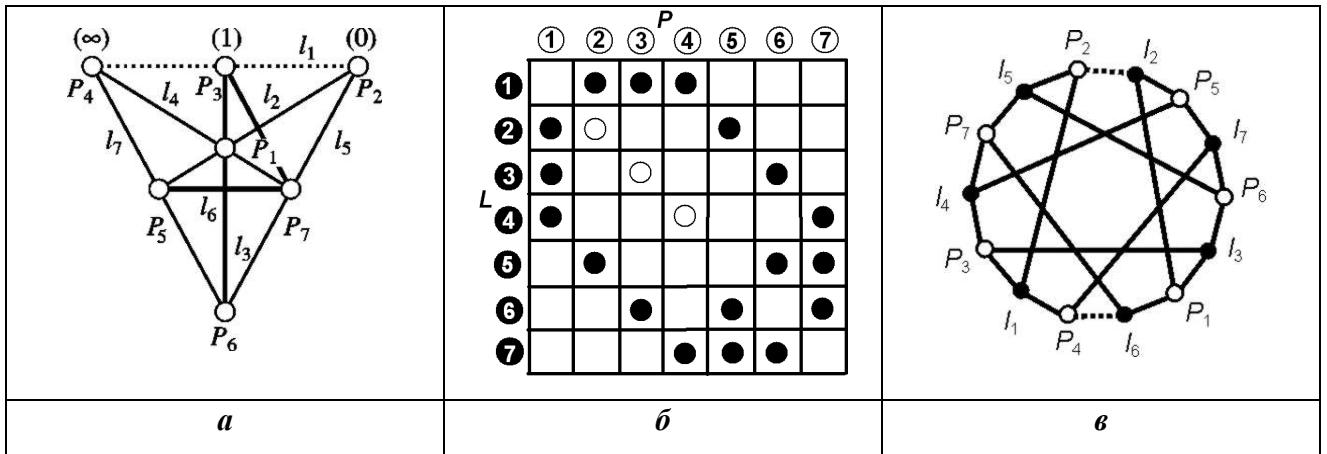


Рис.4.1. Конечная проективная плоскость PG(2,2) или самодуальная конфигурация Фано 7_3
(**a**) - Графическая модель конечной проективной плоскости PG(2,2). Параллельные прямые l_2 , l_5 ; l_3 , l_6 ; l_7 , l_4 пересекаются в идеальных точках 0, 1, ∞ , образующих бесконечно удаленную прямую l_1 . Диагональные “прямые” l_3 и l_6 показаны жирными линиями.
(**б**) - Таблица инцидентности PG(2,2), которая без показанных пустыми кружками знаков инцидентности является ТИ подконфигурации $\{7_3\}^3$.
(**в**) - Граф инцидентности подконфигурации 7_3 , который без показанных пунктиром ребер, соответствующих звеньям P_1P_2 , P_1P_3 , P_1P_4 , прямых l_2 , l_3 , l_4 в а) и пустым кружкам в б), представляет собой граф инцидентности подконфигурации $\{7_3\}^3$ конфигурации 7_3 [21].

Данную самодуальную подконфигурацию можно обозначить как $(1_3+3_2+3_3, 1_3+3_2+3_3) = 1_3+3_2+3_3$, поскольку 7 эквивалентных в 7_3 точек распадаются на три подмножества: через 1 точку проходят 3 прямых. Каждой из этих прямых принадлежат по 2 точки; через 3 точки проходят по 3 прямых, на которых лежат по 3 и 2 точки; наконец, через 3 точки проходят по 2 прямых, которые содержат по 3 точки. Такая форма записи самодуальной подконфигурации фактически определяет карту $\{6,3\}_{2,1}^3$. Действительно, в такой карте должно быть $2(1+3+3) = 14$ вершин и $1 \cdot 3 + 3 \cdot 2 + 3 \cdot 3 = 18$ ребер; при этом одна белая вершина связана с 3 черными, каждая из которых имеет по 2 связи; у 3-х белых

вершин по 3 связи с черными вершинами, не все из которых имеют по 3 связи; а именно, у 3–х белых вершин по 2 связи с черными вершинами.

Рассмотрим, чему соответствует переход от 7_3 к $1_3+3_2+3_3$, осуществляемый удалением трех ребер в графе инцидентности $\text{PG}(2,2)$, (заменой трех “полных” знаков инцидентности на “пустые” в таблице инцидентности $\text{PG}(2,2)$) (рис. 4.1б). На рис. 4.1а идеальные точки $0, 1, \infty$ составляют идеальную прямую; 0 и евклидовы точки $(0,0), (1,0)$ и $(0,1), (1,1)$ – 2 прямые 1–го семейства; ∞ и евклидовы точки $(0,0), (0,1)$ и $(1,0), (1,1)$ – 2 прямые 2–го семейства; 1 и евклидовы точки $(1,0), (0,1)$ и $(1,1), (0,0)$ – 2 “прямые” диагонального семейства. Согласно аксиоматике $\text{PG}(2,q)$, прямые каждого семейства параллельны и сходятся в лежащих на бесконечности точках идеальной прямой. Переименовав точки $0, 1, \infty$ в P_2, P_3, P_4 , а $(0,0), (0,1), (1,0), (1,1)$ в P_6, P_5, P_7, P_1 ; идеальную прямую в l_1 , а прямые 1–го, 2–го и диагонального семейств в $l_5, l_2; l_7, l_4; l_6, l_3$; получим таблицу инцидентности $\text{PG}(2,2)$ (рис. 4.1б). На каждой из прямых лежат по 3 точки, а, следовательно, прямая состоит из двух звеньев, каждому из которых соответствует ребро в графе инцидентности и “полный” знак инцидентности в таблице (рис. 4.1б).

Удаление ребра графа или замена полного знака инцидентности пустым означает уничтожение соответствующего звена прямой. Подконфигурации $1_3+3_2+3_3$ соответствуют уничтожение звеньев прямых l_2, l_3, l_4 между точками P_1 и P_2, P_3, P_4 . При этом параллельные прямые l_2 и l_5, l_4 и l_7, l_3 и l_6 не будут пересекаться (в идеальных точках P_2, P_4, P_3), – переход от проективной к евклидовой геометрии, в которой параллельные прямые не пересекаются. Таким образом, переход от 7_3 к $1_3+3_2+3_3$ соответствует переходу от проективной к евклидовой трактовке (евклидовому представлению) $\text{PG}(2,2)$.

Разбиение 7 эквивалентных линий в $\text{PG}(2,2)$ на 2 неэквивалентных набора (3 и 4 линии) определяется математическим аппаратом, описанным в разделе 4.6.2.2.

В свою очередь, $\text{PG}(2,q)$ – соответствующая проекция векторов из E^3 на плоскость, поэтому данный переход является определенным “обращением” указанной проекции. Если 7_3 отображается на себя группой коллинеаций $L_3(2)$, $1_3+3_2+3_3$ будет отображаться изоморфной группой “нагруженных” коллинеаций $L^W_3(2)$. В рамках аппарата групп цветной W -симметрии [240, 241] $L^W_3(2)$ – младшая группа, вследствие соотношения (4.3):

$$L_3(2) \leftrightarrow L^W_3(2) \supset L_3(2) \cap L^W_3(2) = 2s L_2(2) \leftrightarrow D_{3d}, \quad (4.3)$$

где $L_3(2) = \text{PSL}_3(2)$, $L_3(2) \cap L^W_3(2)$ – подгруппа симметрии, не являющаяся в общем случае нормальным делителем (если $L_3(2) \cap L^W_3(2)$ – нормальная подгруппа индекса 2, то $L^W_3(2)$ относится к шубниковской группе антисимметрии [242]). Таким образом, переходу от 7_3 к

$1_3+3_2+3_3$ соответствует переход от $L_3(2)$ к изоморфной $L^W_3(2)$, конкретизирующий принцип неубывания симметрии: при переходе от $PG(2,2)$ в E^3 симметрия не исчезает, а видоизменяется [243]. Граф инцидентности подконфигурации $1_3+3_2+3_3$ определяет нерегулярное разбиение $\{6,3\}_{2,1}^3$, сферы на гексагоны, которое при условии равенства ребер и углов между ними реализуется в E^3 как конструкция, соответствующая объединению, обозначаемая в дальнейшем кластером алмаза (рис.4.2), который соответствует подробно описанному в [42, 43] невыпуклому параллелоэдру алмаза.

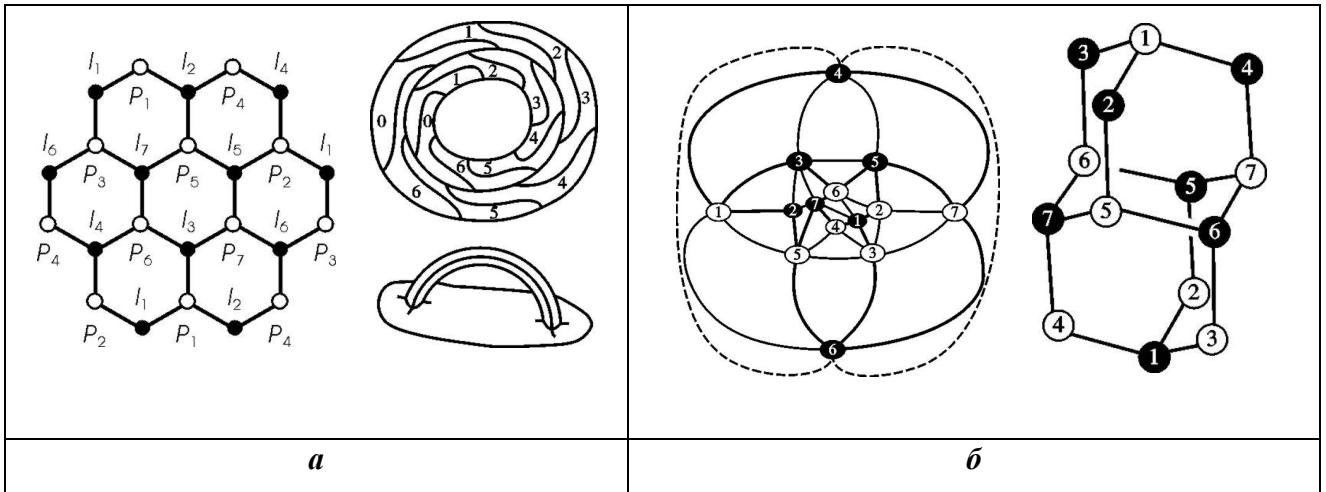


Рис.4.2. Конечная проективная плоскость $PG(2,2)$ или самодуальная конфигурация Фано 7_3 , стереографическая проекция нерегулярной карты $\{6,3\}_{2,1}^3$.

(**а**) - Граф инцидентности $PG(2,2)$ как регулярная, бихроматическая карта $\{6,3\}_{2,1}$ на торе, имеющая 14 вершин, 21 ребро, 7 гексациклов; и его представление сферой с ручкой, которая имеет форму изогнутой треугольной призмы [23, 29].

(**б**) - Стереографическая проекция 14-вершинного разбиения сферы на гексацикли, к которому приводит отбрасывание ручки в торе. Разбиение **б** определяется нерегулярной картой $\{6,3\}_{2,1}^3$, имеющей на 3 ребра и 1 гексацикл меньше по сравнению с картой $\{6,3\}_{2,1}$. Триангуляция сферы показана тонкими линиями, состоящие из 4-х треугольников гексацикли – жирными. Требования равенства (прямолинейных) ребер и углов между ними трансформирует разбиение сферы в кластер алмаза.

В ТИ $PG(2,q)$ два столбца всегда пересекаются по строке, т.е. всегда существует строка, содержащая два знака инцидентности $\bullet\bullet$ и, следовательно, каждая из белых вершин графа инцидентности $PG(2,q)$ находится на минимальном расстоянии от q^2+q остальных. Для отображения $PG(2,q)$ в ее ТИ необходимо ввести пустые знаки инцидентности, что определяет возникновение комбинаций $\circ\bullet$ (или $\bullet\circ$), $\circ\circ$ и позволяет выделить особую подконфигурацию $PG(2,q)$, с особым набором минимальных ($\bullet\bullet$) и неминимальных ($\circ\bullet, \circ\circ$) векторов между белыми вершинами. Например, ТИ (рис.4.1б) определяет набор из 5

минимальных и одного неминимального вектора ($\bullet\bullet = 5-1, 5-3, 5-4, 5-6, 5-7$, $\circ\bullet = 5-2$), который соединяет белую вершину 5 с остальными белыми вершинами параллелоэдра алмаза и представляет собой подсистему системы корней C_3 .

4.2. Конфигурация Мебиуса – Кантора 8_3 и объединение двух полиэдров Бернала Z8

Граф инцидентности 8_3 представляет собой бихроматический граф $\{8\} + \{8/3\}$ степени 3 и обхвата 6 (рис. 4.3a) и совпадает с регулярной картой $\{4+4,3\}$, состоящей из $N_2 = 6$ октагонов на сфере S_2 с двумя ручками. Характеристика Эйлера для указанной карты с $N_0 = 16$ вершинами и $N_1 = 24$ ребрами:

$$\chi = 16 - 24 + 6 = -2 = 2 - 2p, \quad (4.4)$$

где $p = 2$ – число ручек на поверхности S_p , представляющей собой сферу S_0 с p ручками.

Если каждый октагон в $\{4+4,3\}$ разделить двумя ребрами на 3 четырехугольника, на S_2 будут размещены $6 \cdot 3 = 18$ четырехугольников, разделенных $24 + 6 \cdot 2 = 36$ ребрами. Карту $(\tilde{4} + 4,3)^8$, разбитую на четырехугольники обозначим через $(\tilde{4} + 4,3)$. Отбрасывание ручки в карте $\{4,4\}_{b,c}$ на торе S_1 приводит к уменьшению числа ребер на 4, четырехугольников – на 2, а если отбросить две ручки у S_2 , разбитой на четырехугольники, то операция должна привести к карте $(\tilde{4} + 4,3)^8$ – разбитой на четырехугольники сфере S_0 , на которой ребер и четырехугольников будет меньше на 8 и 4, чем в $(\tilde{4} + 4,3)$.

Если для $(\tilde{4} + 4,3)$ отбросить одну ручку, то получим тор S_1 , на котором размещена карта $\{4,4\}_{4,0}$ с 16 вершинами, 32 ребрами и 16 четырехугольниками. Так как отбрасывание общего ребра у двух четырехугольников приводит к образованию гексагона, от разбиения сферы на четырехугольники можно перейти к разбиению на гексагоны.

Покажем, что разбиение октагонов на четырехугольники в $\{4+4,3\}$ (например, октагон 7',7,1',2,3',6,6',5) разбивается ребрами 6–1' и 6'–7 на три четырехугольника (рис. 4.3a); цифры со штрихами нумеруют "черные" вершины; отбрасывание в $(\tilde{4} + 4,3)$ двух ручек и объединение в $(\tilde{4} + 4,3)^8$ четырехугольников в гексагоны приводит к нерегулярному разбиению сферы на гексагоны, содержащему 16 вершин, 21 ребро, и 7 гексагонов (рис. 4.3б):

$$\{4+4,3\} = (\tilde{4} + 4,3)^8 : 16 - 24 + 6 = -2 = 16 - 36 + 18; \quad (\tilde{4} + 4,3)^8 = \{4,4\}_{4,0}^4;$$

$$16 - (36 - 8) + (18 - 4) = 2 = 16 - (32 - 4) + (16 - 2) = 16 - 28 + 14;$$

$$\Gamma(\text{ПК } 2Z8): 16 - (28 - 7) + 14/2 = 2 = 16 - 21 + 7,$$

где $\{4,4\}_{4,0}^4$ – карта на S_0 , полученная отбрасыванием ручки в карте $\{4,4\}_{4,0}$ на S_1 .

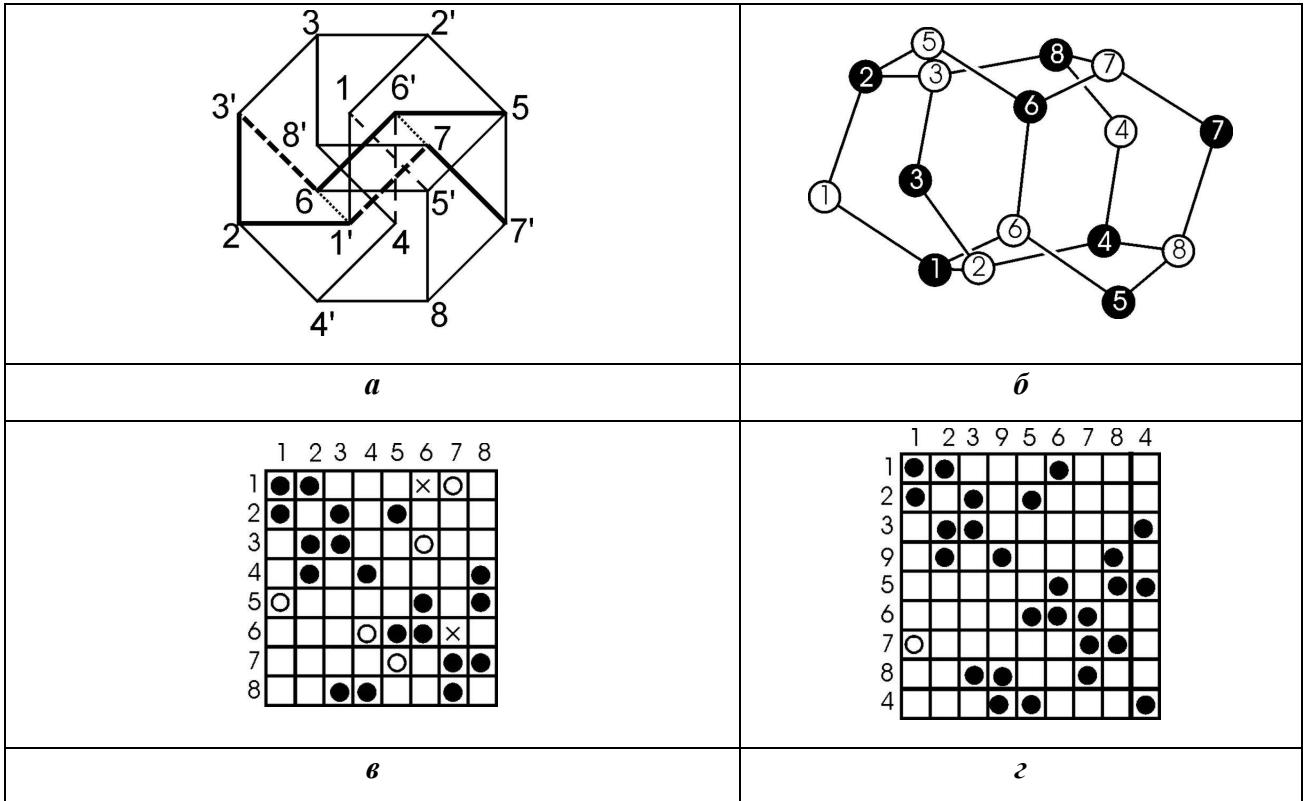


Рис.4.3. Кластер 2Z8, определяющие его граф $\{8\} + \{8/3\}$ и ТИ подконфигураций 8_3 и $(9_3)_2$.

(а) Граф $\{8\} + \{8/3\}$ с двумя не принадлежащими ему ребрами $6-1'$ и $7-6'$ (цифры со штрихами нумеруют черные вершины), которые показаны точками и делят выделенный жирными линиями октагон $7'71'23'66'5$ на три 4-угольника [43].

(б) 16-вершинный кластер 2Z8, определяемый ТИ подконфигурации $\{8_3\}^{5-2}$ и представляющий собой объединение двух (черного и белого) полиэдров Бернала Z8 двойной осью, которая проходит перпендикулярно середине ребра $6-6'$.

(в) ТИ, полученная перестановкой строк и столбцов 4,9 из ТИ $(9_3)_2$ (рис. 4.3б). Ее подтаблица 8x8 определяет ПК 2Z8 лишь с одной не алмазоподобной связью.

(г) ТИ 8_3 , в которой знаки инцидентности, соответствующие показанным пунктиром ребрам графа $\{8\} + \{8/3\}$, изображены пустыми кружками; изображенные крестиками \times знаки инцидентности не принадлежат ТИ 8_3 и соответствуют ребрам $6-1'$ и $7-6'$ графа (а). С крестиками, но без пустых кружков, ТИ 8_3 определяет граф инцидентности подконфигурации $\{8_3\}^{5-2}$, т.е. граф (а) без показанных пунктиром ребер.

Из 12-ти ребер, разбивающих октагоны на четырехугольники в $\{4 + \tilde{4} | 3\}$ и не принадлежащих графу $\{8\} + \{8/3\}$, десять ребер будут удалены при отбрасывании ручек и объединении 4-угольников в гексагоны (два ребра: $6-1'$ и $7-6'$ (рис. 4.3а) останутся).

Поскольку указанные ребра не принадлежат ТИ 8_3 (на рис. 4.3 \mathfrak{e} они отмечены крестиками), но при этом они принадлежат карте $(\tilde{4} + 4,3)$, то, следовательно, подконфигурация $1_2 + 2_3 + 2_2 + 3_3$, состоящая из зачерненных знаков инцидентности и крестиков, будет геометрической. Следовательно, отбрасывание незачерненных знаков инцидентности позволяет ввести в ТИ 8_3 крестики без образования в указанной ТИ “запрещенных” прямоугольников, соответствующих циклам из 4-х ребер.

При требовании равенства ребер и углов между ними данная ТИ определяет кластер $2Z8$, который может быть получен [42, 147] и из ТИ $(9_3)_2$ (рис. 4.4 \mathfrak{d}). Кластер $2Z8$ представляет собой объединение двух полиэдров Бернала, обозначаемых $Z8$; следовательно, граф полиэдра Бернала $Z8$ может быть аналитически получен из (4.5).

4.3. Конфигурации $(9_3)_1$, $(9_3)_2$, $(9_3)_3$, их особые подконфигурации и определяемые ими кластеры

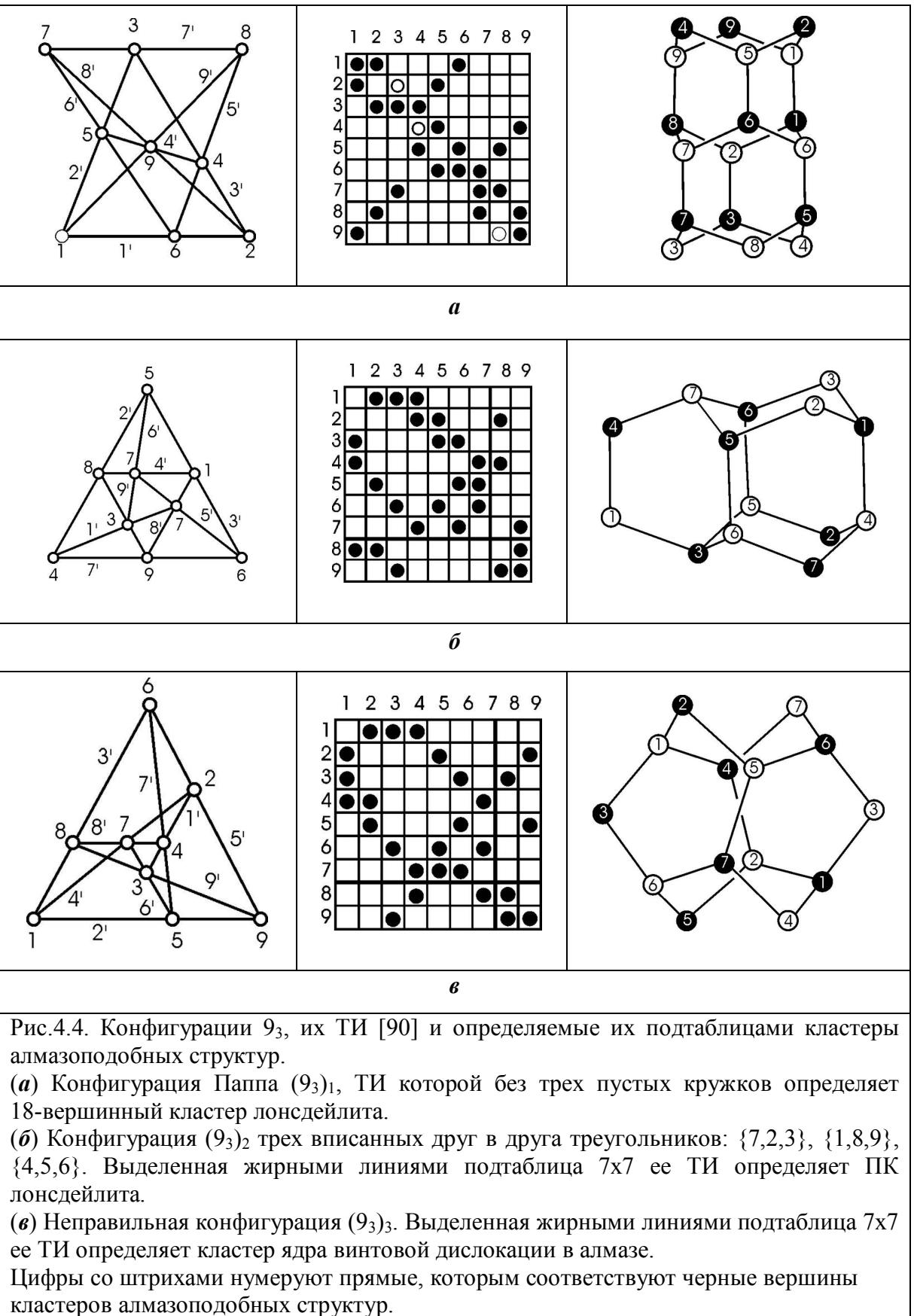
В отличие от единственных реализаций самодуальных конфигураций 7_3 и 8_3 возможны 3 самодуальных конфигурации 9_3 : Паппа – $(9_3)_1$ (рис. 4.4 a), трех вписанных друг в друга треугольников – $(9_3)_2$ (рис. 4.4 \mathfrak{d}) и неправильной конфигурации $(9_3)_3$ (рис. 4.4 \mathfrak{e}).

Если бихроматический граф осуществляет разбиение сферы на гексацикли, то, применяя теорему Эйлера для многогранников, получаем соотношения:

$$F = \frac{1}{2}(m_1+n_1) - 1, \quad E = 3F, \quad (4.6)$$

где m_1 и n_1 – число белых и черных вершин графа; F – число гексациклических конфигураций; E – число ребер. Самодуальная конфигурация $n_3 = (n_3, n_3)$ может быть представлена в форме $((m_1+m_2)_3, (n_1+n_2)_3)$, позволяющей выделить в ТИ n_3 подтаблицу $m_1 \times n_1$.

Если подтаблица содержит не менее $3(\frac{1}{2}(m_1+n_1) - 1)$ знаков инцидентности, так что в каждой строке и столбце их не менее двух, согласно (4.6) такая подтаблица ТИ должна определять разбиение сферы на гексацикли непосредственно или при последующем отбрасывании отмеченных пустыми кружками знаков инцидентности.



Наиболее простой случай $m_2 = n_2 = 0$ иллюстрирует пример конфигурации Паппа $(9_3)_1$, ТИ которой без трех пустых кружков (а именно, ТИ подконфигурации $\{(9_3)_1\}^{(3)}$) определяет

18-вершинный кластер лонсдейлита с восемью гексациклами (рис. 4.4 α). Вариант $m_2 = n_2 = 2$ реализуется для конфигурации $(9_3)_2 = ((7+2)_3, (7+2)_3)_2 = ((7+2)_3)_2$, подтаблица 7×7 ТИ которой однозначно определяет 14-вершинный кластер для структуры лонсдейлита с шестью гексациклами: двумя креслами и четырьмя ваннами (рис. 4.4 δ). Подконфигурацию $(9_3)_2$ с указанной ТИ будем обозначать $((7\cup2)_3)_2$. Аналогично, подконфигурация $((7\cup2)_3)_3$ конфигурации $(9_3)_3$ однозначно определяет 14-вершинный кластер, генерирующий ядро винтовой дислокации в структуре алмаза, с шестью гексациклами: двумя твист-ваннами и четырьмя твист-креслами (рис. 4.4 ϵ).

4.4. Конфигурация Дезарга 10_3 и алломорфное отображение 20-вершинного кластера алмаза в додекаэдр

Додекаэдр – карта $\{5,3\}$ на сфере (в каждой вершине сходятся 3 пентагона), его многоугольником Петри является декацикл. 6 таких декациклов, содержащих все 30 ребер и 20 вершин додекаэдра, изоморфны карте $\{10,3\}_5$ (в каждой вершине сходятся 3 декацикла; вершины, отстоящие друг от друга на 5 ребер из многоугольника Петри, отождествляются) на неориентируемой поверхности. Карта $\{10,3\}_5$ содержит и пентацикли, являющиеся ее минимальными циклами (рис. 4.5 α).

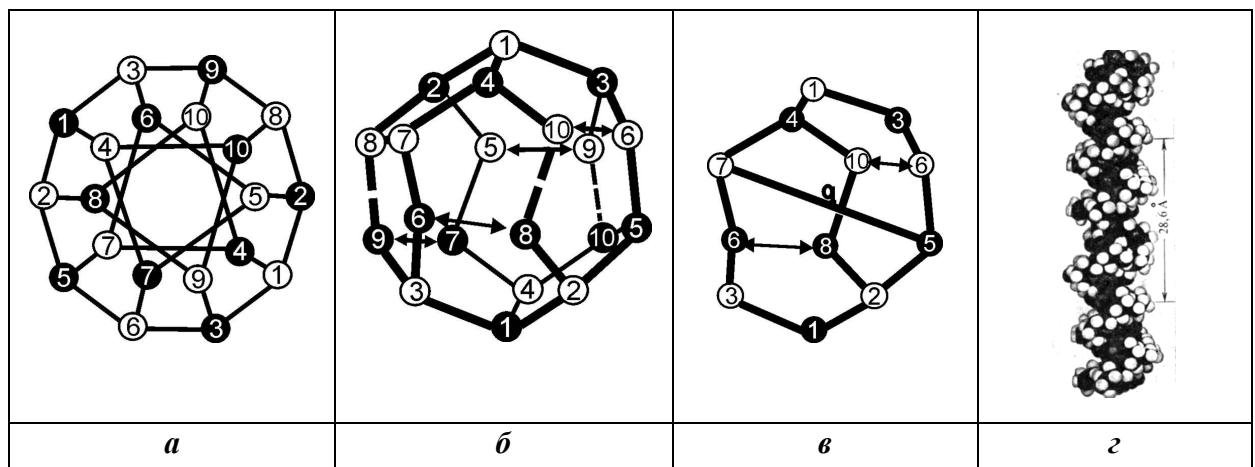


Рис. 4.5.

(*а*) Бихроматический граф $\{10\} + \{10/3\}$ [147].

(*б*) Додекаэдр, как бихроматический граф.

(*в*) Перебрасывание ребер за счет 2π -дисклинации q с превращением гексациклов в декацикли.

(*г*) Модель структуры коллагена, состоящая из 3-х цепей преобразующихся друг в друга вращением на $108^\circ = 2\pi \cdot 3/10$ и трансляцией на 2.86 \AA , период молекулы 28.6 \AA [233].

Карта $\{10,3\}_5$ алломорфна карте $\{10,3\}'_5$, отличающейся от нее лишь тем, что ее минимальными циклами являются гексацикли; переход от $\{10,3\}_5$ к $\{10,3\}'_5$ (и обратно)

осуществляется 2π -дисклинациями [7]. Так, например, если в декацикле $13'65'21'36'74'$, разделенном на 4 пентацикла, ребро $8'10$ заменить ребром $5'7$, то помимо 4 пентациклов (двух старых и двух новых) декацикл разбивается на 2 гексацикла: $13'65'74'$ и $76'31'25'$ (рис. 4.5б). Карта $\{10,3\}'_5$ вкладывается в граф $\{10\} + \{10/3\}$, который (при раскраске вершин в два цвета и соединении ребрами лишь вершин разных цветов) совпадает с бихроматическим графом $\Gamma(10_3)$ – графом инцидентности конфигурации Дезарга 10_3 (рис. 4.5а).

Таким образом, оказывается возможным вложение подграфа додекаэдра $\{5,3\}$ в граф инцидентности основополагающей конструкции проективной геометрии:

$$\begin{array}{ccc} \Gamma(10_3) \supset \{10,3\}'_5 \cap \{10,3\}_5 \subset \{5,3\} & & \\ \downarrow & & \downarrow \\ \{10,3\}'_5 \xleftarrow{\text{al}} & & \xrightarrow{\text{al}} \{10,3\}_5, \end{array} \quad (4.7)$$

где $\xleftarrow{\text{al}} \xrightarrow{\text{al}}$ – символ алломорфизма, подграф $\{10,3\}'_5 \cap \{10,3\}_5 = \{d\}$ содержит декациклы, но не содержит пента- и гексацикли.

Граф $\Gamma(10_3)$ задается таблицей инцидентности ТИ 10_3 , подтаблица которой из 24 заполненных кружков (рис. 4.6а) определяет 20 вершинный кластер алмаза $\{10_3\}^6$ (рис. 4.6б). Если в ТИ 10_3 (рис. 4.6а) поменять местами тройки двойных кружков, получим ТИ 10_3 (рис. 4.6в), подтаблица которой ТИ $\{d\}$ определяет кластер алмаза с графом $\{d\} = \{10_3\}^6_d$, в котором связи $56'$, $67'$ и $75'$ разорваны, а $89'$, $9,10'$ и $10,8'$ – установлены. При раскраске вершин додекаэдра в 2 цвета, его граф задается ТИ $\{5,3\}$, отбрасывание 6 стрелок (соответствующих ребрам между вершинами одного цвета) приводит к ТИ $\{d\}$, определяющей подграф додекаэдра $\{d\} = \{5,3\}^6$. Взаимные трансформации тетракоординированных кластеров $\{5,3\}^6$ и $\{10_3\}^6$ осуществляются по алломорфизму (4.7), посредством введения трех 2π -дисклинаций, которые сохраняют симметрию D_3 кластеров и меняют 3 ребра графа $\{5,3\}^6$ ($\{10_3\}^6$) на 3 ребра графа $\{10_3\}^6$ ($\{5,3\}^6$).

Последнее определяет возможность взаимных трансформаций кластеров при сжатии (с вращением), вдоль тройной оси, прикладываемом лишь к двум вершинам на указанной оси (рис. 4.6а, в) и вызывающим синхронные винтовые движения всех вершин, которые реализуются посредством шарнирного прокручивания ребер. Если удалить в додекаэдре 9 ребер (стрелки и пунктир на рис. 4.6а) и оставшийся каркас “раскручивать” до образования 3 новых ребер такой же длины (двойные линии на рис. 4.6в), возникает кластер алмаза; при этом, если в 20-вершинном кластере алмаза удалить 3 ребра (двойные линии на рис. 4.6а), то

при “скручивании” оставшегося каркаса до равенства длин всех (пунктир и сплошная линия на рис. 4.6б) ребер образуется додекаэдр.

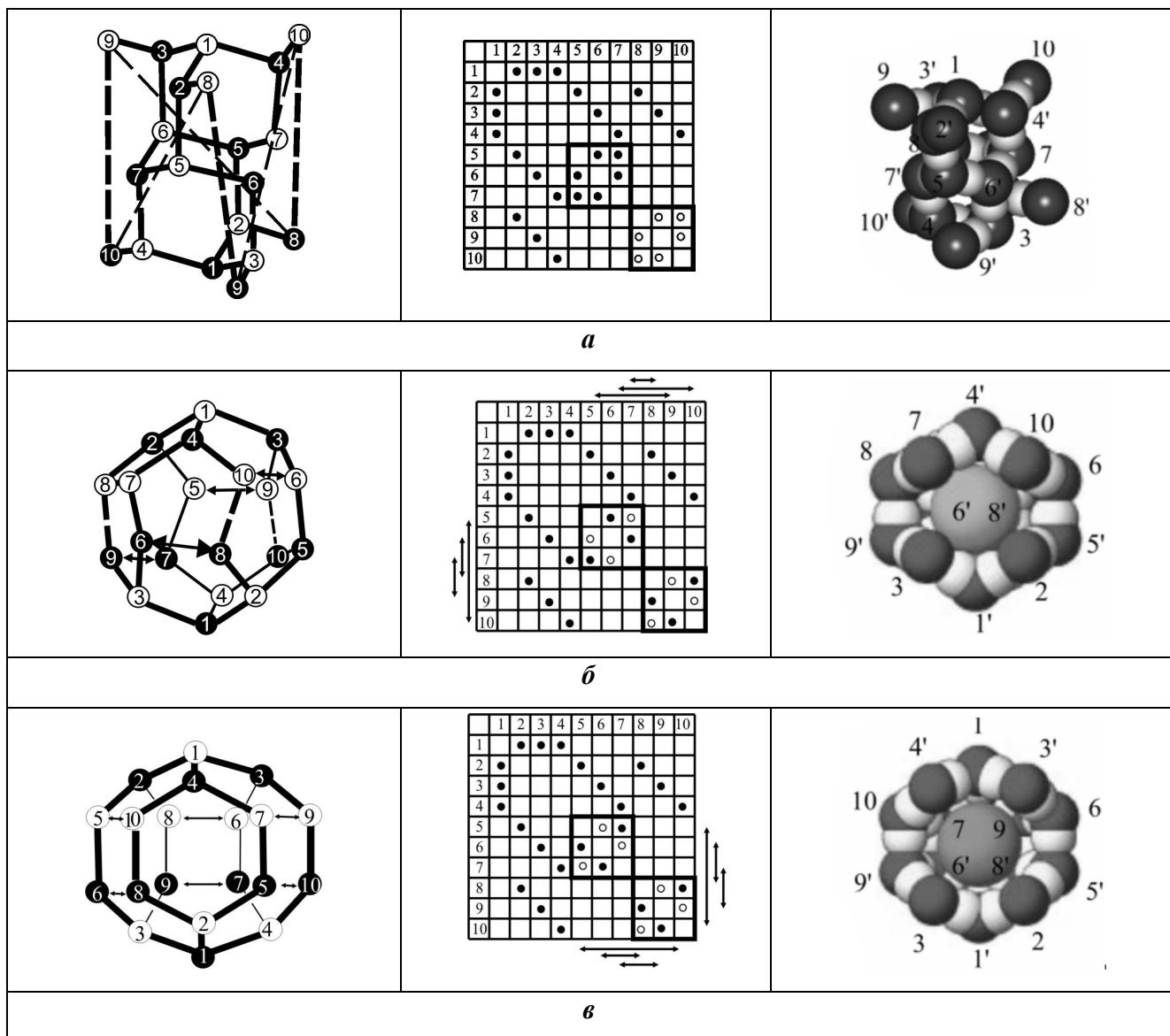


Рис. 4.6. Тетраоординированные 20-вершинные ПК и определяющие их таблицы инцидентности.

(а) 20-вершинный ПК алмаза, (б) – додекаэдр, (в) – малый додекаэдр. Определяющие их таблицы инцидентности отличаются лишь стрелками и парами троек двойных кружков, в выделенных квадратах. Справа от таблиц ПК изображены ван-дер-ваальсовых очертаниях хозяйствской и гостевых подсистем. Близость объемов гостевых подсистем ПК (б) и (в) очевидна. Ребрам ПК соответствуют в таблицах зачерненные кружки. Связям, которые не являются ребрами, – пустые кружки. Связи между вершинами одного цвета показаны стрелками.

В качестве ПК, в структурах газогидратов за додекаэдром следует малый додекаэдр (рис. 4.6в) который имеет 6 пентагональных, 3 гексагональные и 3 квадратные грани.

Аналогично додекаэдру (рис. 4.6 δ), последний задается ТИ подконфигурации 10_3 дополненной стрелками, определяющими связи между вершинами одного цвета. ТИ (рис. 4.5 ε , рис. 4.6 δ, ε) отличается лишь стрелками и тройками двойных пустых кружков, соответствующие им связи “перебрасываются” элементарно-подобными преобразованиями, поэтому додекаэдр и малый додекаэдр являются элементарно-подобными полиэдрами.

4.5. Алмазоподобный полурегулярный политоп {240} и его линейные подструктуры

В предыдущем разделе, кластеры алмазоподобных структур (АС) трактовались как результат отображения в E^3 конструкций проективных геометрий, поэтому рассмотрим, что представляет собой структура алмаза в E^4 и существуют ли неевклидовы 3-мерные алмазоподобные конструкции.

По определению [16], самосклейка решеток корней,

$$D_n^+ = D_n \cup [1]D_n, \quad (4.8)$$

является алмазоподобной упаковкой при нечетных n и решеткой при четных n . Упаковка D_4^+ совпадает с примитивной кубической решеткой Z^4 и не обладает характеристиками алмазной структуры:

$$D_3^+ = D_3 \cup [1]D_3, \quad (4.9)$$

где D_3 – ГЦК-решетка, а $[1]$ – вектор сдвига на $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$. Следовательно, бесконечная структура алмаза по алгоритму (4.8) не может быть построена в E^4 .

4.5.1. Построение политопа {240} по “замкнутому” алгоритму Госсета

Группа [3,3,5] обладает двумя неэквивалентными 4-мерными представлениями, которым соответствуют некристаллографические решетки корней H_4 и \tilde{H}_4

$$\tilde{H}_4 = \varphi H_4, \quad H_4 \cap \tilde{H}_4 \leftrightarrow \{3,3,5\} \cap \varphi \{3,3,5\} = \{3,4,3\}, \quad \varphi^2 = 1, \quad (4.10)$$

где $[3^{4,2,1}] \ni \varphi \notin [3,3,5]$; $\{3,3,5\}$ и $\varphi\{3,3,5\}$ - корневые политопы для H_4 и \tilde{H}_4 ; т.к. $\varphi\{3,3,5\} \supset \{3,4,3\}$, то $\varphi \in N([3,4,3])$ – нормализатору $[3,4,3]$ в точечной группе всех движений E^4 .

Пусть χ - преобразование, отображающее $\{3,4,3\}$ в дуальный и конгруэнтный ему политоп $\{3,4,3\}^*$:

$$\chi\{3,4,3\} = \{3,4,3\}^*, \quad \chi^2 = 1, \quad \chi \notin [3,4,3], \quad \chi \in N([3,4,3]), \quad (4.11)$$

где $\{3,4,3\} \cup \chi\{3,4,3\} = \{48\}$ - политоп 48 и $\chi \in [3^{4,2,1}]$ [244].

Согласно (4.10), $\chi\{3,3,5\}$ и $\varphi\chi\{3,3,5\}$ содержат вершины политопа $\{3,4,3\}^*$, поэтому 240-вершинные энантиоморфные "политопы": $\{3,3,5\} \cup \chi\{3,3,5\} = \{240\}_r$ и $\varphi\{3,3,5\} \cup \chi\varphi\{3,3,5\} = \{240\}'_l$ будут содержать вершины политопа $\{48\}$. Если к $\{240\}'_l$ применить преобразование $\varphi = \varphi^{-1}$, получим:

$$\varphi\{240\}'_l = \{3,3,5\} \cup \varphi\chi\varphi\{3,3,5\} = \{240\}_l, \quad \{3,3,5\} \cup \chi\{3,3,5\} = \{240\}_r \quad (4.12)$$

и, следовательно, энантиоморфизм политопа $\{240\}$ – алмазной структуры на сфере S^3 – определяется добавлением к политопу $\{3,3,5\}$ “правой” ($\chi\{3,3,5\}$) или “левой” ($\varphi\chi\varphi^{-1}\{3,3,5\}$) конгруэнтной ему структуры.

Применение к политопу $\{3,4,3\}^*$ алгоритма Госсета возвращает к началу построения 120 вершин политопа $\{3,3,5\}^*$, конгруэнтного $\{3,3,5\}$ и состоящего из вершин политопов $sn\{-3,4,3\}^*$ и $\{3,4,3\}$. Поэтому очевидно, что объединение политопа $\{3,3,5\}$ с указанным политопом будет “инвариантно” относительно алгоритма Госсета (рис. 4.7a). Таким образом, политоп $\{240\}$ автоматически возникает при “замыкании” алгоритма Госсета, который позволяет построить политоп $\{3,3,5\}$ из политопа $\{3,4,3\}$ [24]. Действительно, если на каждом из 96 ребер $\{3,4,3\}$ (рис. 4.7б) разместить вершину, делящую ребро в отношении $1:\tau$, возникнет нерегулярный 96-вершинный политоп $sn\{-3,4,3\}$, состоящий из 24 икосаэдров, центры которых образуют политоп $\{3,4,3\}^*$. Центрами 24 икосаэдров, составляющих $sn\{-3,4,3\}^*$, являются вершины исходного политопа $\{3,4,3\}$ (рис. 4.7б).

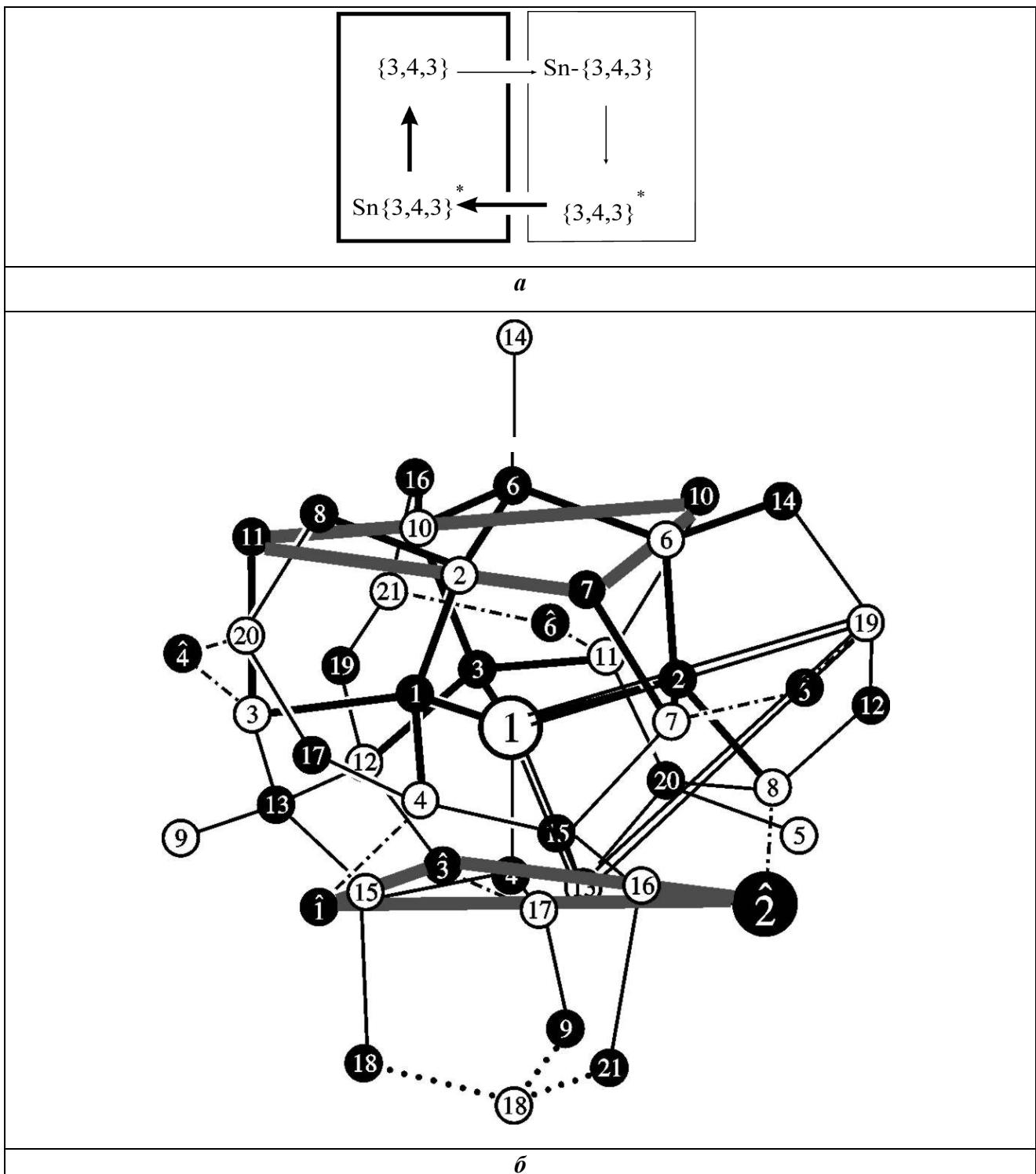


Рис.4.7. “Замкнутый” алгоритм Госсета.

(а) Последовательность шагов “алгоритма Госсета” изображена тонкими стрелками, а его замыкание – жирными. Политоп $\{240\}$ определяется замкнутым циклом схемы как объединение исходного политопа $\{3,3,5\}$ (тонкая рамка) с его конгруэнтной копией (толстая рамка).

(б) Построение политопа $\{240\}$ по “замкнутому” алгоритму Госсета. Октаэдр $\hat{1}, \hat{2}, \hat{3}, 7', 10', 11'$ принадлежит политопу $\{3,4,3\}$, его центр 1 – октаэдру с гранью 1,19,13 из политопа $\{3,4,3\}^*$. 1 и $2'$ – центры икосаэдров из белых и черных шаров, принадлежащих политопам $\text{Sn}-\{3,4,3\}$ и $\text{Sn}-\{3,4,3\}^*$.

Ребро октаэдра в $\{3,4,3\}$ ($\{3,4,3\}^*$) делится вершиной $sn-\{3,4,3\}$ ($sn-\{3,4,3\}^*$) в отношении $1:t$, “вправо” либо “влево” от середины (рис. 4.7б). Последнее определяет два возможных варианта объединения политопа $\{3,3,5\}$ с конгруэнтным ему политопом, т.е. “правый” и “левый” политопы $\{240\}$:

$$\{240\}_r = (sn-\{3,4,3\}_r \cup \{3,4,3\}_r^*) \cup (sn-\{3,4,3\}_r^* \cup \{3,4,3\}) = \{3,3,5\} \cup \chi \{3,3,5\}$$

$$\{240\}_l = (sn-\{3,4,3\}_l \cup \{3,4,3\}_l^*) \cup (sn-\{3,4,3\}_l^* \cup \{3,4,3\}) = \{3,3,5\} \cup \varphi^{-1}\chi\varphi \{3,3,5\} \quad (4.13)$$

будут инвариантны относительно алгоритма Госсета. Алгоритм Госсета [24] позволяет построить политоп $\{3,3,5\}$ по политопу $\{3,4,3\}$, а “замыкание” алгоритма Госсета - достроить политоп $\{3,3,5\}$ до политопа $\{240\}$.

4.5.2. Расслоение Хопфа и 2 варианта разбиения политопа $\{240\}$ на линейные подструктуры

Политоп $\{240\}$ – это конечный 4-мерный аналог алмазоподобной структуры, он содержит 240 вершин, которые принадлежат 3-мерному пространству постоянной положительной кривизны - сфере S^3 [6]. В каждой вершине этого 4-мерного многогранника сходятся 18 гексациклов в конформации “скрученная ванна”; это максимально достижимое количество гексациклов [177], т.е. он обеспечивает плотнейшее (из всех возможных) тетракоординированное окружение каждой вершины [6]. Политоп $\{240\}$ является объединением двух копий имеющего 120 вершин политопа $\{3,3,5\}$ [6]; все вершины обеих копий лежат на одной и той же сфере, но при этом один многогранник повернут на определенный угол относительно другого. Решение многих структурных задач требует отображения политопа $\{240\}$ в 3-мерное евклидово пространство E^3 [6, 177].

Сферу S^3 в евклидовом пространстве E^4 можно представить “базой” (сферой S^2 в пространстве E^3), каждой точке которой соответствует “слой” (окружность Вилларсо S^1 [6]); это представляет собой расслоение Хопфа [222]: $S^3 \rightarrow S^2$ (слой S^1). В дискретном случае политопа $\{3,3,5\}$ из множества точек сферы S^2 выбираются 12 вершин идеального икосаэдра, а на окружности Вилларсо, проходящей через вершину икосаэдра, размещается 10 вершин политопа; таким образом, каждая вершина базы нагружена слоем из 10 точек (рис.4.8а). Хотя база (икосаэдр) не принадлежит политопу $\{3,3,5\}$, но этот способ удобен для отображения политопа $\{3,3,5\}$ в пространство E^3 .

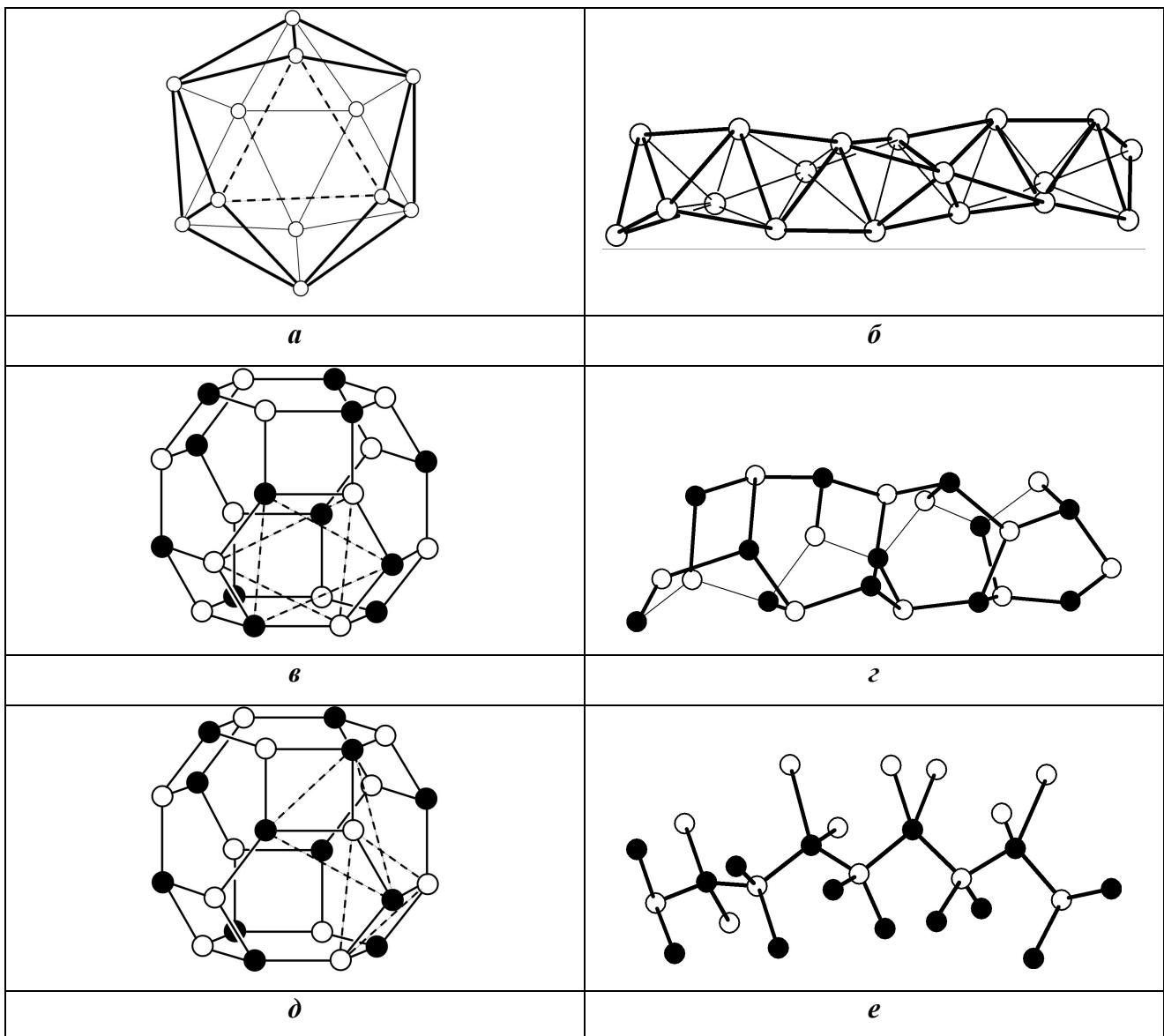


Рис.4.8.

- (а) Икосаэдрическая база расслоения Хопфа, все вершины принадлежат четырем треугольникам. В S^3 каждому треугольнику соответствует тетраспираль [222].
- (б) Объединение 3-х соседних 10-вершинных цепей в тетраспираль - единственный вариант линейной подструктуры расслоения Хопфа для политопа $\{3,3,5\}$ с икосаэдром в качестве базы.
- (в) База расслоения Хопфа для политопа $\{240\}$ как объединение двух прямых икосаэдров (вершины которых показаны черными и белыми шарами, соответственно; центры всех шаров лежат на одной сфере S^2) в усеченный октаэдр [78]. Объединение в шестиугольник “черного” и “белого” правильных треугольников, показанных пунктиром (1-й вариант), соответствует “каналу” (г) [6]; остальные 3 шестиугольника дают еще 3 канала.
- (г) “канал” [6].
- (д) База расслоения Хопфа для политопа $\{240\}$ [78, 134]; объединение “черного” и “белого” равнобедренных треугольников, показанных пунктиром (2-й вариант) соответствует линейной тетракоординированной “углеводородно-подобной” цепи (е) “типа $C_{20}H_{40}$ “ в политопе $\{240\}$. Все 24 вершины базы охватываются 3-мя такими объединениями совместно с правильными треугольниками на верхнем и нижнем основаниях.
- (е) Линейная тетракоординированная “углеводородно-подобная” цепь.

Треугольная грань икосаэдра соответствует $3 \cdot 10 = 30$ -вершинной тетраспирале, а 4 грани икосаэдра, охватывающие все его $4 \cdot 3 = 12$ вершин, дают картину расположения тетраспиралей Коксетера [24, 171, 174, 236] в пространстве E^3 (картина является условной, т.к. для базы все 4 геликоида эквивалентны), рис.4.8б.

Известен [6] вариант отображения линейной подструктуры политопа {240} в “канал” в E^3 (рис.4.8г); стенки такого канала образованы гексациклами в конформации “скрученная ванна”. Выбор подсистемы ребер (из множества его ребер), охватывающих все вершины политопа {240}, не является однозначным, возможны иные варианты выбора линейных подструктур политопа. Существует вариант, в котором совокупности вершин формируют не “каналы”, а цепные последовательности; он представлен в настоящем разделе [134]. Он необходим, если вершины в итоговой системе предполагается разделить на **два** вида (условно, виды “C” и “H”), которые присваиваются в соответствии с образовавшейся структурой, а не по цвету вершин, – так, что все вершины будут принадлежать тетракоординированым (“углеводородно-подобным”) цепям вида C_nH_{2n} . В политопе {3,3,5} максимальный порядок оси есть 30, т.е. в соответствующей цепи может быть только 30 вершин, связанных ребрами [24], поэтому в политопе {240} в соответствующей этой оси тетракоординированной цепи может быть максимум 60 вершин, что ограничивает ее протяженность.

Нами показано [134], что в политопе {240} можно выделить лишь три 60 - вершинные “углеводородно-подобные” цепи вида $C_{20}H_{40}$, и при этом остаются еще 2 совокупности по 30 вершин, образующие при переходе в E^3 геликоиды Бердийка-Коксетера [24, 171]. Показано также, что разбиение такого типа является *единственным*. Действительно, 60-вершинной “углеводородно-подобной” цепи вида $C_{20}H_{40}$ в политопе {240} соответствует 6-вершинное объединение 2-х равнобедренных треугольников базы, которая представляет собой 24-вершинный усеченный октаэдр [78] (рис.4.8в,д). Поэтому расслоение Хопфа позволяет свести задачу к задаче охвата всех вершин *прямого* [13] икосаэдра минимальным количеством треугольников (в *прямом* икосаэдре 8 граней – это равносторонние треугольники, через центры которых проходят оси 3-го порядка, а остальные 12 граней – равнобедренные треугольники [13]). Охват оказывается возможным осуществить либо с помощью 4-х равносторонних треугольников, что соответствует варианту, рассмотренному в [6], и приводит (после удвоения равносторонних треугольников) к 4-м “каналам” (рис.4.8в,г), либо с помощью одного равностороннего и 3-х равнобедренных треугольников (рис.4.8д,е), что и приводит (после удвоения равнобедренных треугольников) к указанному выше результату: трем 60 - вершинным “углеводородно-подобным” цепям вида $C_{20}H_{40}$ и 2-м совокупностям по 30 вершин, образующим при переходе в E^3 геликоиды Бердийка-

Коксетера. Три тетракоординированные цепи вида “ $C_{20}H_{40}$ ” (рис.4.8e) скручены друг с другом, подобно геликоидам Бердийка-Коксетера.

4.6. Порождающие кластеры углеводородно-подобных цепей

Углеводородно-подобные цепи, которые обсуждаются ниже в настоящем разделе, играют важнейшую роль в природе, поскольку имеют прямое отношение к биологическим мембранам.

4.6.1. Молекулярная основа биомембран

Биомембранны – это сложные молекулярные образования, отделяющие содержимое клеток от внешнего окружения; при этом биомембранны обеспечивают возможность избирательного транспорта различных молекулярных компонентов, а также функционирования большого количества мембрановстроенных макромолекул (биополимеров). Способность биомембранны выступать одновременно в роли этих (на первый взгляд, противоречащих друг другу по задачам) систем, - “барьера”, “контролера”, “интерфейса”, свидетельствует о том, что строение и свойства молекул, из которых биомембрана образована, не являются случайными. Основу биомембран составляют молекулы фосфолипидов, они содержат головную группу и две углеводородные цепи. Цепи могут быть линейными (насыщенными и ненасыщенными), моно- и полиразветвленными, содержать циклическую группу (например, циклопропановую, циклопропеновую или циклопентеновую) в боковой цепи, локализованной в разных местах.

Комбинации количества атомов углерода в цепи (N), количества (d) двойных связей, их местоположений (Δ или ω) и конфигурации (*cis*, *trans*), наличия или отсутствия разветвлений, вида последних и их локализации, образуют огромное количество теоретически возможных вариантов строения цепи. Более того, любой из таких вариантов может быть реально синтезирован, и вне мембранны существовать в любых концентрациях. Однако, цепи фосфолипидов различного строения далеко не равнозначны как “биомембранообразующие” компоненты, они резко отличаются по степени распространенности. Наиболее часто встречаются цепи, имеющие определенные особенности в строении [167, 245-247] (хотя и среди них одни цепи присутствуют в больших, а другие – в существенно меньших количествах), они и образуют “матрикс” мембранны. Эти особенности состоят в следующем:

(i) цепи – линейные; в них присутствуют или отсутствуют двойные связи (т.е. цепи являются ненасыщенными или насыщенными);

(ii) количество N атомов углерода в цепи обычно является четным и ограничено диапазоном $N \sim 12 - 24$;

(iii) двойные связи $C=C$ в цепи обычно имеют конфигурацию *cis*;

(iv) первая двойная связь в цепи расположена преимущественно у 3-го, 6-го или 9-го атома углерода, считая от концевой группы CH_3 (что отмечается символами $\omega 3$, $\omega 6$ или $\omega 9$ в условном обозначении структуры цепи);

(v) полиеновые (полиненасыщенные) цепи содержат обычно не более 6 двойных связей;

(vi) двойные связи в полиеновых цепях имеют преимущественные расположения также и относительно друг друга в цепи: они обычно являются “метиленпрерывающимися” (т.е. между каждой парой двойных связей расположена только одна группа CH_2).

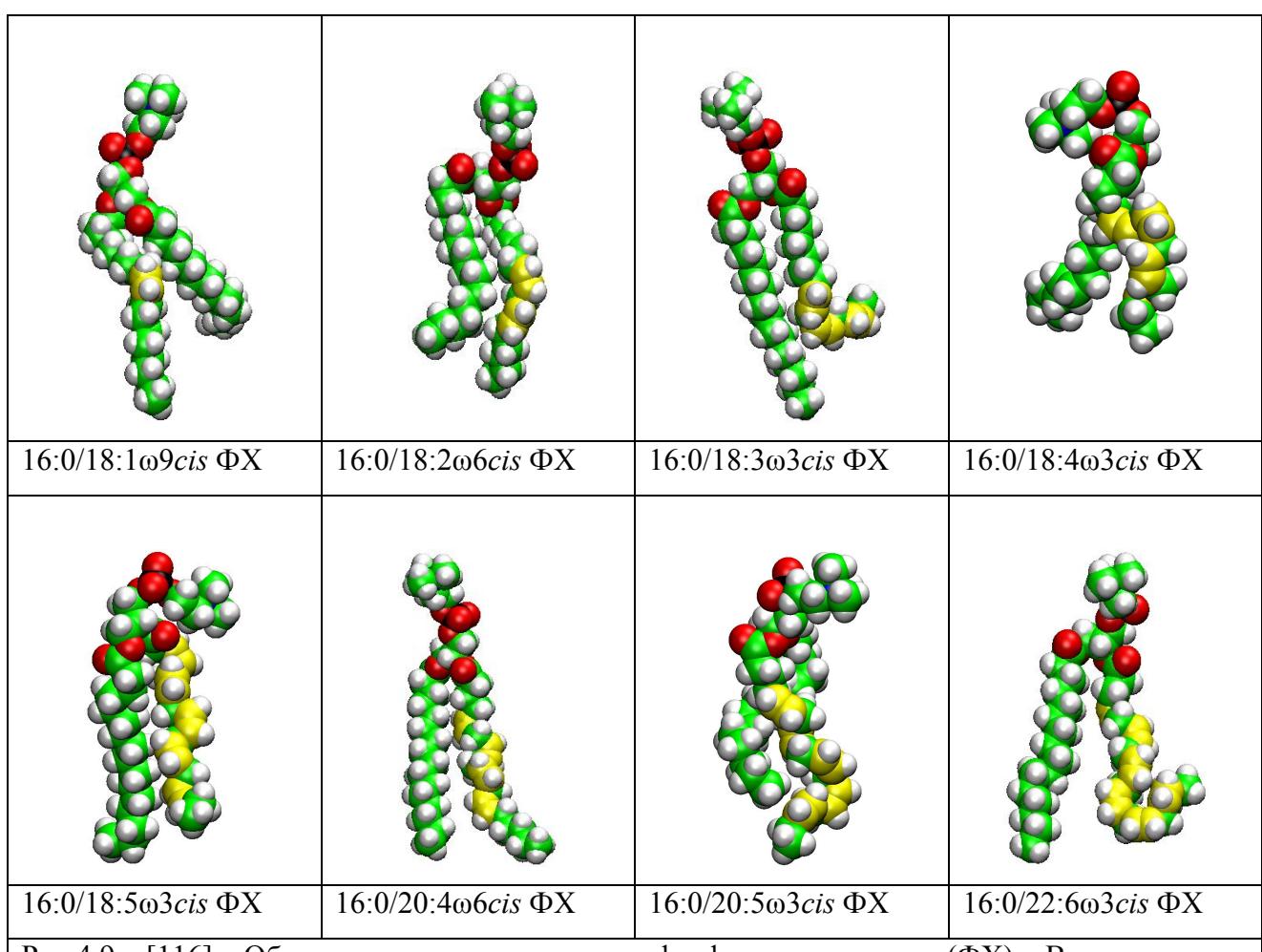


Рис.4.9. [116]. Объемные модели молекул фосфатидилхолинов (ФХ). В символьном обозначении молекулы первую и вторую цепи разделяет косая черта (слэш). В обозначении $N:d\omega k$ *cis* цепи число N – это количество атомов углерода; число d после двоеточия – количество двойных связей; *cis* – их конфигурация; число k – это местоположение первой двойной связи в цепи, которое отсчитывается от концевой группы CH_3 цепи (на что указывает символ ω , не принимающий численных значений); двойные связи являются метиленпрерывающимися.

Объемные модели ряда липидных компонентов биомембран – молекул фосфатидилхолинов (ФХ) представлены на рис.4.9 [116], а углеводородных цепей – компонентов молекул липидов - на рис.4.10 [116, 117].

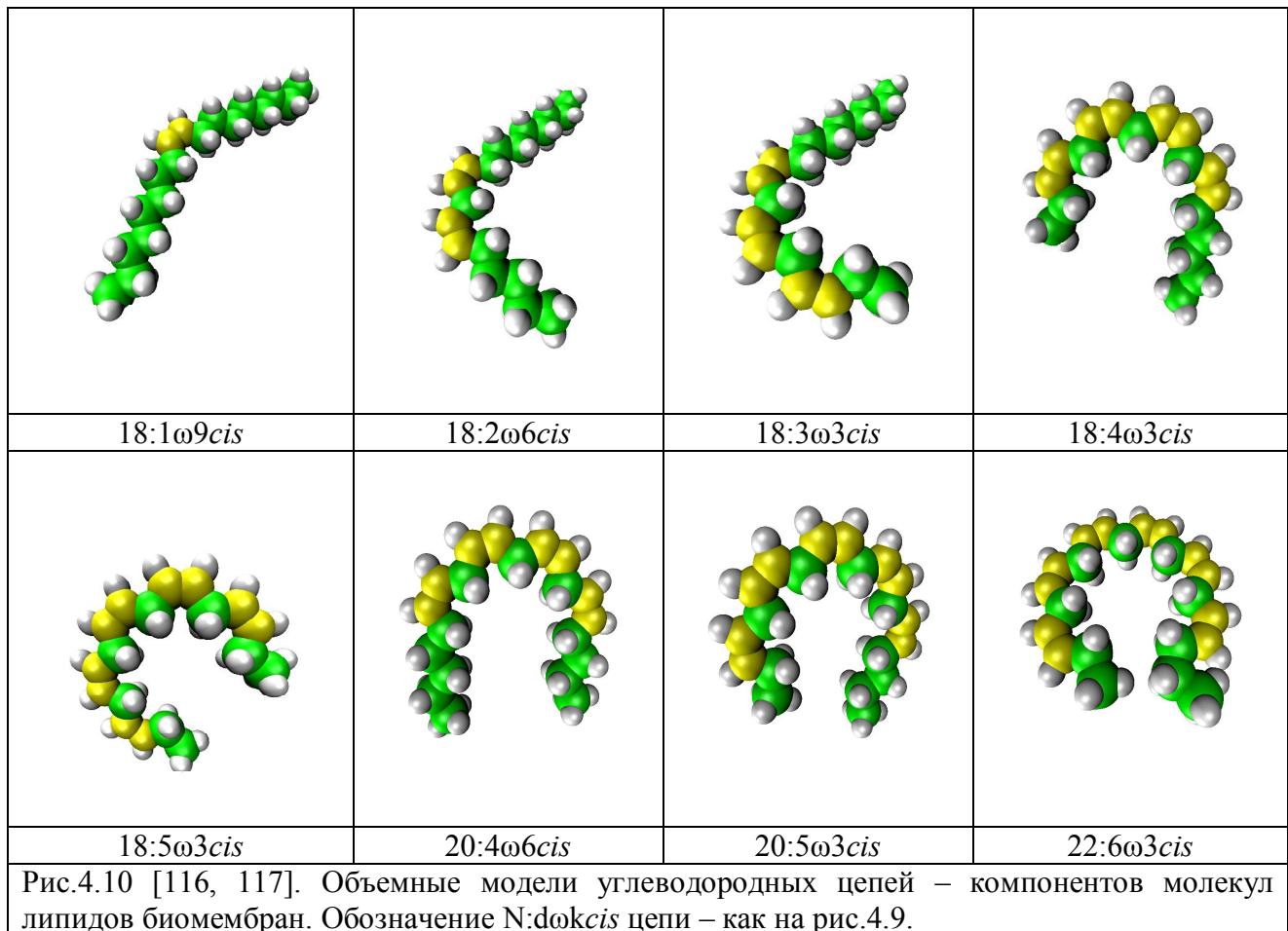
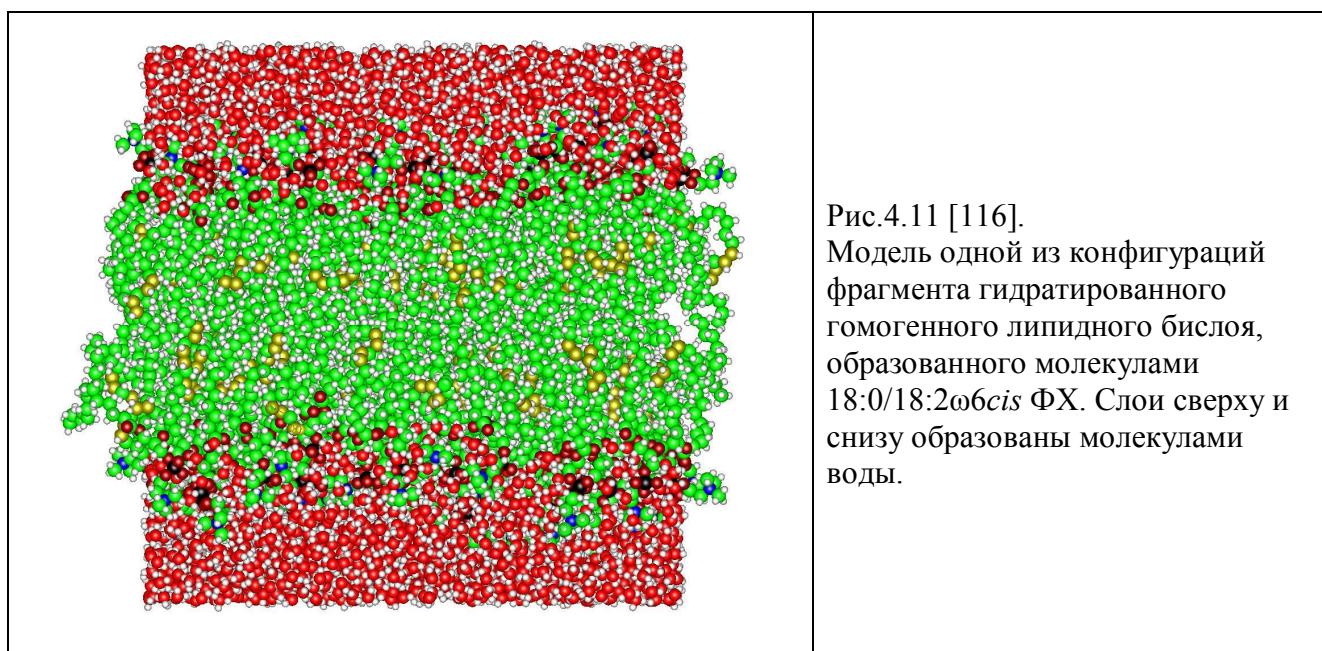


Рис.4.10 [116, 117]. Объемные модели углеводородных цепей – компонентов молекул липидов биомембран. Обозначение N: ω k*cis* цепи – как на рис.4.9.

Модель фрагмента гомогенного бислоя (мембранны), образованного одним из возможных вариантов ФХ – молекулами 18:0/18:2 ω 6*cis* ФХ, представлена на рис.4.11 [116].

Вследствие того, что молекулы липидов имеют столь фундаментальную значимость для всех объектов в живой природе, *причины* существования закономерностей в их структуре, которые являются общими и характерными для цепей липидов биомембран (и которые приводят к свойствам, обеспечивающим возможность выполнения липидами упомянутых выше функций), тоже должны быть фундаментальными. Однако эти причины ранее в литературе (до появления наших работ [116-118, 121, 123, 131, 132, 134-136]) не обсуждались. Это единство в строении определяется соответствием “некристаллографических” симметрий фрагментов цепей симметриям фрагментов высокосимметричных структур, которые отображаются в Е³ из 3-мерных неевклидовых пространств постоянной (положительной и отрицательной) кривизны (см. Главу 2).



4.6.2. Описание некристаллографической симметрии углеводородных компонентов фосфолипидов

Для описания некристаллографической симметрии линейных тетракоординированных структур, по аналогии с тетраэдрическими цепями (Глава 2), возникает вопрос о поиске некоторой идеальной структуры, в которой окружение каждой вершины является максимально симметричным, а тетракоординированная цепь – ее линейной подструктурой. Такой структурой является только “политоп {240}”, 4-мерный аналог алмаза на 3-мерной сфере S^3 [6, 177], порядок группы его симметрии равен 2880. Как уже отмечалось (раздел 4.5.2), политоп {240} можно представить в виде объединения двух конгруэнтных [6] (условно, “белого” и “черного”) политопов {3,3,5} на одной сфере S^3 , в котором вершины одного политопа расположены в центрах тетраэдров второго, и наоборот [6, 24]. Политоп {240} является энантиоморфным, т.к. существуют 2 его варианта, правый и левый (в которых гексациклилы образуют, соответственно, правые и левые конформации “скрученной ванны”).

Базовая симметрийная структурная единица для *тетракоординированных цепей*, по аналогии с тетраблоком для *тетраэдрических цепей*, должна быть выявлена из анализа отображения в E^3 подструктур политопа {240}. Вследствие указанного строения политопа {240} она должна представлять собой такую **комбинацию** тетраблоков первого и второго политопов {3,3,5} (т.е. **комбинированный** тетраблок), которая обладает **наибольшей возможной** симметрией. Очевидно, это означает, что каждая белая вершина комбинированного тетраблока, по крайней мере, либо должна быть тетракоординирована

черными вершинами, либо являться частью белого тетраэдра, который тетракоординирует черную вершину; аналогичное требование относится к каждой черной вершине. Ясно также, что при этом количество черных вершин, тетракоординирующих 7 вершин белого тетраблока (связанных ребрами с его вершинами) в комбинированном тетраблоке, не может превышать 7 (т.е. количества вершин черного тетраблока): это определяется числом вершин тетраблока, который можно отобразить из политопа $\{3,3,5\}$ в E^3 .

При выделении комбинированного тетраблока следует учесть, что (см. раздел 4.5.2) отображение линейной подструктуры политопа $\{240\}$ в E^3 может быть осуществлено либо в канал [6] (рис.4.8 g), либо в тетракоординированную (“углеводородно-подобную”) цепь [134] (рис.4.8 e). Для нашей цели следует выделить вариант комбинированного тетраблока, который отвечает не каналу, а именно *тетракоординированной цепи*.

На рис.4.12 a воспроизведена вершинная фигура [177] политопа $\{240\}$ – 27-вершинный кластер, объединение нескольких параллельных 3-мерных его “сечений” [24, p.298-299, Tabl.V].

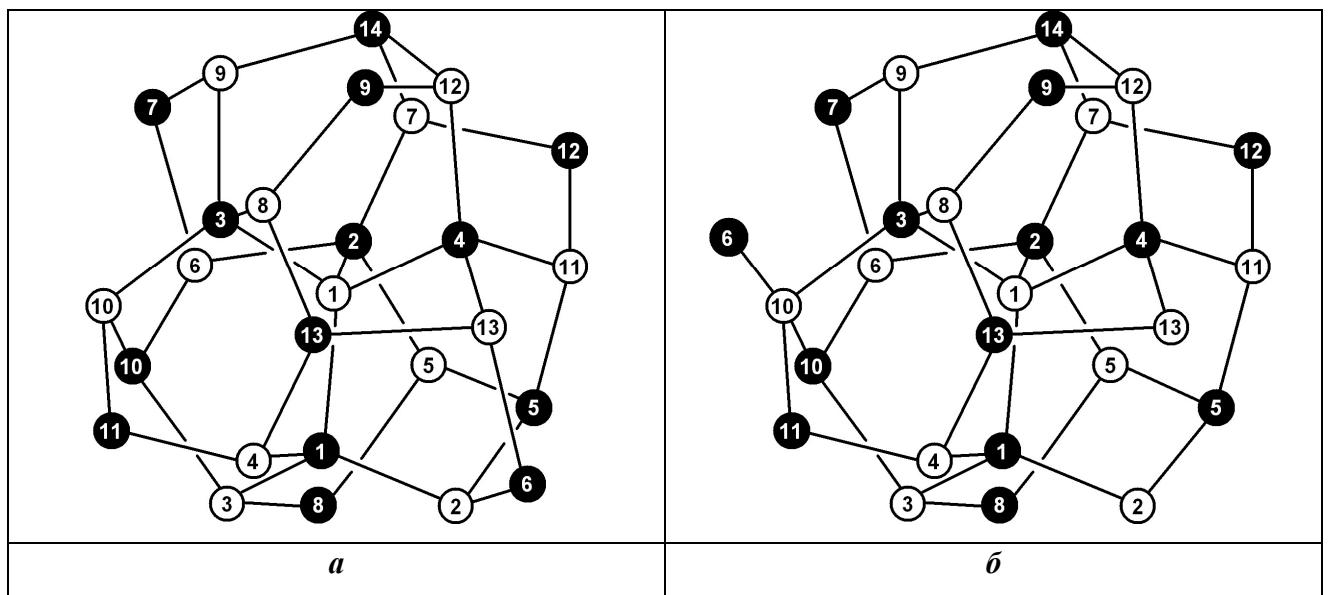


Рис.4.12.

(*а*) – Фрагмент из 27 вершин, образующий вершинную фигуру политопа $\{240\}$ [6, 177].
 (*б*) – Минимальный граф политопа $\{240\}$, содержащий составной тетраблок.

Вершины кластера из политопа $\{240\}$ на рис.4.12 a не только окрашены (белые или черные), но и пронумерованы. В тексте белые вершины будем обозначать цифрами без штриха, черные – со штрихом. В центральной белой вершине 1 этого кластера сходятся 18 гексациклов в конформации “скрученная ванна” (одной из конформаций с наименьшей энергией [6]). Подчеркнем, что 18 гексациклов сходятся лишь в **центральной** вершине 1 этого кластера (в других вершинах – меньше), тогда как в политопе $\{240\}$ это имеет место

для **каждой** вершины (можно сказать, что **каждая** вершина в политопе {240} является центром кластера, изображенного на рис.4.12a). Данный кластер можно рассматривать условно в качестве “визуализированной” в E^3 части политопа {240} из E^4 , предполагая также, что при необходимости кластер в E^3 может быть модифицирован или расширен в требуемом направлении дополнительными гексациклами или их частью (вершинами).

Отметим известное свойство политопа {240} [244], которое будет использовано в дальнейшем. Белый политоп {3,3,5} может быть переведен в черный {3,3,5} осью 2-го порядка C_2 , которая проходит через середину **любого** избранного ребра между белой и ближайшей к ней черной вершиной (перпендикулярно ребру) и середину такого ребра между белой и черной вершиной, которое повернуто относительно избранного ребра на 37.76° ($\sim 38^\circ$). Для каждого избранного ребра существуют всего 3 оси C_2 [244] (т.е. это ребро является осью 3-го порядка C_3). Это, в частности, означает, что совокупность середин всех ребер политопа {240} и совокупность всех его вершин – это совокупности точек, **выделенные** симметрией политопа {240}. Каждая ось C_2 совмещает белый тетраэдр, центрированный черной вершиной, с черным тетраэдром, центрированным белой вершиной [6, 24]. Поэтому политоп {240} можно назвать белым политопом {3,3,5}, который “декорирован” [177] черным политопом {3,3,5}. Например, если избрано ребро 1 - 1' (рис.4.12a), то первая ось C_2 проходит через середины ребер 1 - 1' и 10 - 11', вторая – через середины ребер 1 - 1' и 13 - 6', и третья – через середины ребер 1 - 1' и 5 - 8'. Любая из указанных трех осей C_2 совмещает белый тетраэдр 1-2-3-4, центрированный черной вершиной 1', с черным тетраэдром 1'-2'-3'-4', центрированным белой вершиной 1 (рис.4.12a). Согласно сказанному выше, если в политопе {240} выделен белый линейный (энантиоморфный) тетраблок, центром которого является вершина 1, то **комбинированный** линейный тетраблок можно образовать, если объединить этот белый линейный тетраблок с конгруэнтным ему черным линейным тетраблоком, полученным из белого поворотом вокруг оси C_2 , проходящей **либо** через середину связи 1 - 4' (или, что эквивалентно, через середину связи 1 - 3'), **либо** через середину связи 1 - 2' (или, что эквивалентно, через середину связи 1 - 13'). В итоге можно получить 2 варианта комбинированного линейного тетраблока: один из них соответствует каналу [43], а другой – тетракоординированной цепи. Ниже, в разделе 4.6.2.1, рассмотрен вариант для цепи.

4.6.2.1. Составной тетраблок

Вершинную фигуру (кластер) политопа {240} (рис.4.12a), как упоминалось, можно модифицировать, или расширять в требуемом направлении дополнительными гексациклами (или их частью). Для того чтобы комбинированный линейный тетраблок было удобно

представить на рисунке целиком, целесообразно несколько модифицировать вершинную фигуру (рис.4.12 α): “разомкнуть” некоторые гексациклы, но явно “визуализировать” факт тетракоординированности белой вершины 10. Этого можно добиться, например, перемещением **только** одной черной вершины 6'; полученный кластер (рис.4.12 δ) представляет собой минимальный граф политопа {240}, содержащий искомый тетраблок.

Пусть белый линейный тетраблок образован следующими вершинами (рис.4.12 δ):

$$10, 1, 11, 9, 8, 12, 13,$$

т.е. центром тетраблока является вершина 1. Поворот этого тетраблока вокруг оси C_2 , проходящей через середину связи 1 - 3', переводит белый тетраблок в конгруэнтный ему черный, что однозначно определяет все 7 вершин этого черного тетраблока:

$$4', 3', 6', 2', 1', 10', 11',$$

поскольку при таком повороте вершины преобразуются следующим образом (рис.4.12 δ):

$$10 \rightarrow 4', \quad 1 \rightarrow 3', \quad 11 \rightarrow 6', \quad 9 \rightarrow 2', \quad 8 \rightarrow 1', \quad 12 \rightarrow 10', \quad 13 \rightarrow 11'.$$

Если повернуть вокруг оси C_2 , проходящей через середину связи 1 - 4', то результат будет эквивалентен предыдущему.

Вершины этого черного линейного тетраблока заполняют в политопе {240} вершины, являющиеся соседними с вершинами белого тетраблока. При этом также удовлетворяются описанные выше требования: каждая белая вершина комбинированного тетраблока тетракоординирована черными вершинами или является частью белого тетраэдра, который тетракоординирует черную вершину; аналогично – для каждой черной вершины. Черный линейный тетраблок совместно с белым линейным тетраблоком образует единый комбинированный линейный тетраблок, который получил название *составной* [131] ($7 + 7 = 14$ вершин). Его группа симметрии изоморфна группе $PSL(2,7) \cdot C_2$ порядка $168 \cdot 2 = 336$ (точнее, группе $PSL(2,7) \cdot Z_2$, где Z_2 – группа 2-го порядка). По структуре *составной* тетраблок – это фрагмент линейной тетракоординированной цепи (рис.4.13 α).

После того, как комбинированный (*составной*) тетраблок уже образован, можно отметить следующее. Возможность перевода друг в друга осью C_2 исходных (черного и белого) тетраблока фактически не является определяющей для получения комбинированного тетраблока. Так или иначе, результат достигнут **объединением** двух тетраблоков, которые в

политопе {240} удалось взаимно скоррелировать по ориентации и расположить в **ближайшем** соседстве так, что ребром соединены центры тетраблоков. В итоге центр **составного** тетраблока оказался расположенным в середине этого ребра, т.е. в точке, принадлежащей одной из двух указанных выше совокупностей точек, **выделенных** симметрией политопа {240}. Поворот одного из тетраблоков вокруг C_2 для получения второго был использован лишь как методический прием. Иными словами, комбинированный тетраблок можно было получить сближением имеющихся вариантов исходных тетраблоков, обеспечивая лишь их тесный “контакт” и выполнение требования тетракоординирования вершин в паре (с учетом совместности комбинированного тетраблока со структурой политопа {240}, используя фрагмент рис.4.12 a или рис.4.12 b как “модель” последнего). Такой подход можно использовать для конструирования комбинированных тетраблоков из других пар исходных тетраблоков.

Например, если исходный белый тетраблок в политопе {240} является плоским (неэнантиоморфным), то конгруэнтный ему черный плоский тетраблок можно получить поворотом белого тетраблока вокруг некоторой оси C_2 . С другой стороны, можно просто избрать два плоских тетраблока в политопе {240} и провести поиск возможностей их взаимного размещения для объединения. Оказалось, что из-за структурных особенностей политопа {240} осуществить объединение плоских тетраблоков в единую конструкцию с соблюдением указанных выше требований невозможно.

Линейный вариант тетраблока никаким поворотом не может быть преобразован в плоский вариант (и наоборот), поскольку они не конгруэнтны. Но, как отмечено выше, это не важно: исследовать возможность максимального сближения линейного тетраблока с плоским с выполнением требования тетракоординирования вершин в паре можно “на модели” фрагмента политопа {240} (рис.4.12 a,b). Оказалось, что результат объединения линейного и плоского тетраблоков представляет интерес для приложений.

4.6.2.2. Декорированный тетраблок

Рассмотрим линейный (белый) и плоский (черный) тетраблоки. Проведем их объединение с учетом описанных выше требований для получения варианта, который, с одной стороны, будет обладать максимально достижимой симметрией, а с другой – может быть “вложен” в политоп {240}. Пусть белый линейный тетраблок образован следующими вершинами (рис.4.12 a или рис.4.12 b):

$$10 - 1 - 11 - 9 - 8 - 12 - 13.$$

Центр 1 белого линейного тетраблока в политопе {240}, как и любая белая вершина политопа, является центром тетраэдра из черных вершин (в данном случае, вершин 1', 2', 3', 4'). Белый линейный тетраблок, центр которого декорирован таким черным тетраэдром, представляет собой часть *составного* тетраблока, рассмотренного в разделе 4.6.2.1 (из которого удалены черные вершины 6', 10' и 11', рис.4.13a). Если черные вершины этого тетраэдра (мысленно) соединить отрезками прямых между собой, то из них только один отрезок соединяет те вершины, которые являются центрами двух крайних (торцевых) тетраэдров белого линейного тетраблока (в данном примере это отрезок, соединяющий вершины 3' и 4'). Середина этого отрезка расположена *наиболее близко* к центру 1 белого тетраблока (рис.4.12a,б). Поэтому именно отрезок 3' – 4' следует избрать **общим** ребром всех тетраэдров того черного плоского тетраблока [121, 122, 127], который декорирует данный белый линейный тетраблок. При этом, однако, отрезок 3' – 4' не является ребром политопа {240}, поэтому середина расстояния между центром 1 белого линейного тетраблока и центром черного плоского тетраблока (который расположен в середине отрезка 3' – 4' [121, 122, 127]) не совпадает ни с одной из отмеченных выше (особых) точек, **выделенных** симметрией политопа {240}.

Рассмотрим оставшиеся пять черных вершин 1', 2', 9', 13', 14' плоского тетраблока: они лежат в плоскости, которая перпендикулярна **общему** ребру 3' – 4' [121, 122, 127] тетраблока. Две вершины (1' и 2') принадлежат исходному черному тетраэдру, тетракоординирующему центр 1 белого линейного тетраблока, а три вершины 9', 13', 14' “выпадают”: они значительно удалены от центра белого линейного тетраблока, и при этом не позволяют выполнить требование тетракоординирования вершин, поскольку не могут оказаться вершинами какого-то *одного* черного тетраэдра (рис.4.12a,б), в центре которого окажется белая вершина комбинированного тетраблока. Поэтому, для того чтобы *априори* повысить симметрию искомого комбинированного тетраблока данного типа, следует эти 3 вершины из него исключить. Комбинированный тетраблок, полученный в итоге, сводится к “декорированию” белого линейного тетраблока только частью черного плоского - черными вершинами 1', 2', 3', 4', которые тетракоординируют центр 1 белого тетраблока. При этом все семь вершин линейного белого тетраблока, в свою очередь, тетракоординируют максимально возможное количество вершин этого черного тетраэдра – две (на рис.4.12a,б вершины 10, 1, 9 и 8 тетракоординируют вершину 3', а вершины 1, 11, 12 и 13 тетракоординируют вершину 4'). Кроме того, центр черного тетраэдра 1', 2', 3', 4' и общий центр такого комбинированного тетраблока теперь совпадает с вершиной 1 – центром белого тетраблока, т.е. с точкой, принадлежащей одной из двух указанных выше совокупностей

точек, **выделенных** симметрией политопа {240}. Этот комбинированный тетраблок был назван **декорированным** [131]; он имеет всего $7+4 = 11$ вершин (рис.4.13б).

Важно отметить, что **декорированный** тетраблок (рис.4.13б) можно рассматривать (i) либо как часть **комбинированного** тетраблока, являющегося объединением **двух линейных** тетраблоков (т.е. **составного** тетраблока), после удаления из него трех черных вершин 6', 10' и 11' (рис.4.13а),
(ii) либо как часть **комбинированного** тетраблока, являющегося объединением **линейного и плоского** тетраблоков, после удаления из него трех черных вершин 9', 13' и 14' (рис.4.12а,б).

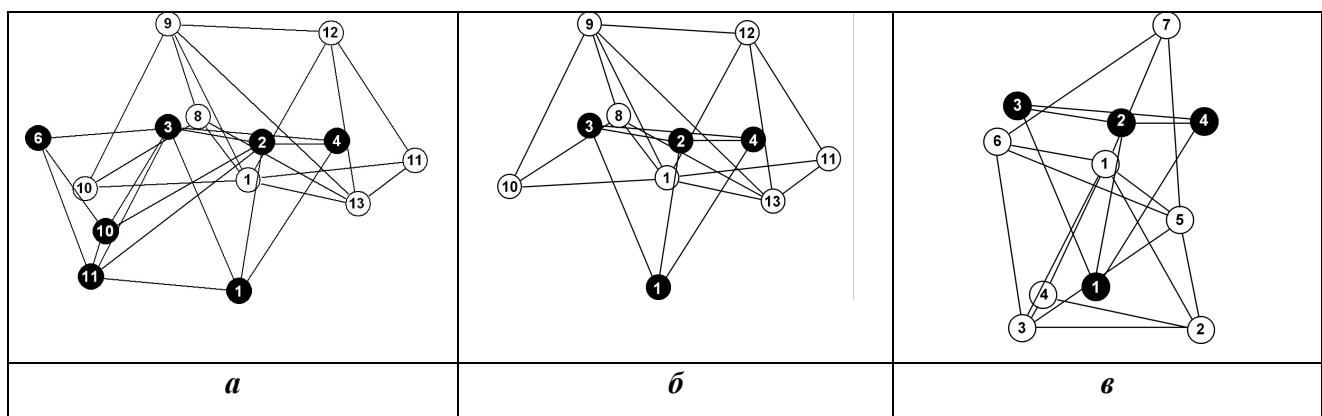
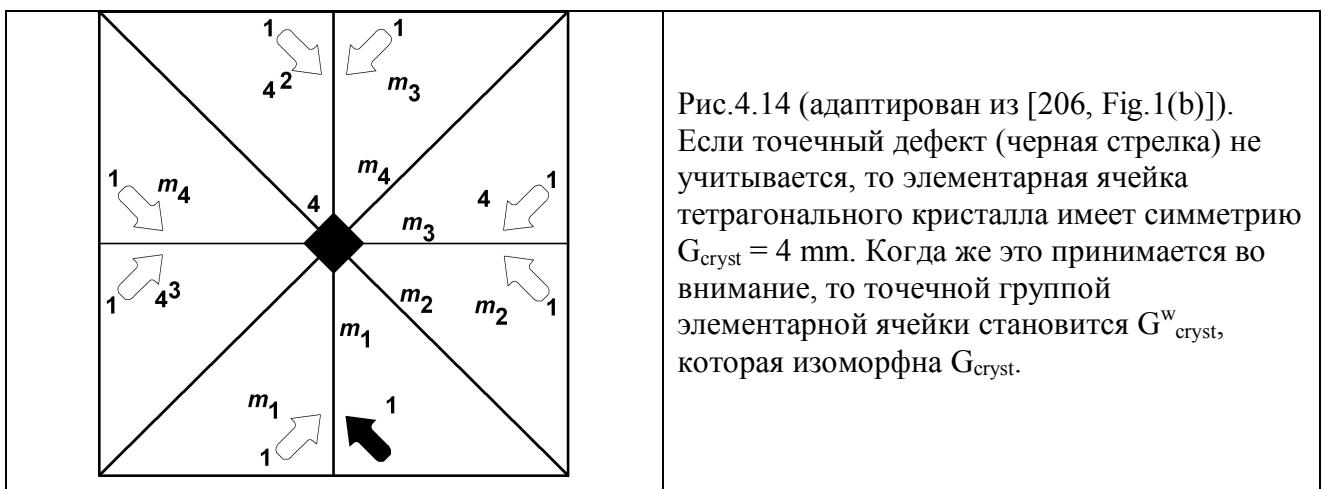


Рис.4.13. Комбинированные тетраблоки для образования цепей (номера вершин отвечают номерам вершин 27-вершинного графа на рис.4.12б):
(а) - составной тетраблок, $7+7=14$ вершин [131];
(б, в) - декорированный тетраблок, $7+4=11$ вершин [131] (б – горизонтальное и в – вертикальное расположение линейного (белого) тетраблока в декорированном тетраблоке).

Можно утверждать, что объединение **двух линейных** тетраблоков является более однородным, чем объединение **линейного и плоского** тетраблоков, т.е. более симметричным. Процедура удаления трех черных вершин 9', 13' и 14', действительно, позволила **повысить** симметрию оставшегося 11-вершинного варианта (**декорированного** тетраблока), поскольку оказалось, что можно избрать более симметричного “предшественника”: тот же 11-вершинный вариант мог быть получен удалением трех черных вершин (6', 10' и 11') из более симметричного объединения **двух линейных** тетраблоков.

Выявить (описать) симметрию декорированного тетраблока можно теперь на основе закона сохранения симметрии для квазизолированных систем [243, с.57; 206]. Согласно этому закону диссимметризация системы на одном уровне структуры компенсируется симметризацией на другом. При этом первоначальные группы симметрии сохраняются на абстрактном уровне, преобразуясь в группы обобщенной (цветной) симметрии, *изоморфные* исходным [243, с.57; 206]. Напомним (глава 2, раздел 2.6.1.4), что концепция так называемой

“цветной симметрии” [206, 207] возникла как обобщение понятия геометрической симметрии. Каждой точке геометрической фигуры присваиваются негеометрические свойства, а именно “цвета” (или наборы цветов), и ставится задача изучения групп симметрии таких цветных объектов. В зависимости от конкретной физической проблемы абстрактное понятие “цвета” может интерпретироваться по-разному [207]. В случае декорированного тетраблока возможны 3 “цвета” вершин: черный и белый (которые соответствуют цветам вершин линейных тетраблоков), а также, например, зеленый (отвечающий бывшим вершинам черного **линейного** тетраблока, которые будут удаляться в декорированном тетраблоке). Согласно теории цветной симметрии [206], для любой группы G можно построить группу $(G)^w$ цветной симметрии, которая изоморфна группе G . Примером может служить рис.4.14 (адаптирован из [206, Fig.1(b)]).



Таким образом, группа симметрии декорированного тетраблока изоморфна группе симметрии составного тетраблока: это группа $\text{PSL}(2,7) \cdot C_2$ порядка $168 \cdot 2 = 336$ (группа $\text{PSL}(2,7) \cdot Z_2$, где Z_2 – группа 2-го порядка).

В зависимости от того, какое количество элементов исходной группы G нагружается преобразованиями “перемены цвета” [206], может быть построено несколько групп цветной симметрии, изоморфных исходной группе G . Для того чтобы построить группу цветной симметрии, отвечающую случаю декорированного тетраблока, следует определить количество элементов симметрии, которое будет нагружено преобразованиями “перемены цвета”.

Комбинированный тетраблок (и составной, и декорированный) является **частью** вершинной фигуры полигонта {240} (рис.4.12a). Эта вершинная фигура, если исключить из нее черную вершину 14' (что дает в итоге 26 вершин), определяется *подтаблицей* таблицы инцидентности конечной проективной плоскости $\text{PG}(2,3)$, см. соотношение (4.2). Таблица

инцидентности имеет размерность 13×13 (т.к. число точек и число прямых в конечной проективной плоскости $PG(2,p)$ равно p^2+p+1). В каждом ее столбце и в каждой строке имеется $p+1 = 4$ знака инцидентности, т.е. в графе инцидентности этой таблицы, рис.4.15 a , каждая вершина тетраоординирована. Поэтому данная конфигурация, $PG(2,3)$ (и ее ТИ, рис.4.15 b) является охватывающей (определяющей) конструкцией для тетраоординированных алмазоподобных структур с числом вершин ≤ 26 .

Представляет интерес вопрос о том, какое количество из 336 элементов группы симметрии декорированного тетраблока (изоморфной группе $PSL(2,7) \cdot C_2$) будет нагружено преобразованиями “перемены цвета”. Для ответа на этот вопрос требуется использовать математические результаты, описанные ниже.

Комбинаторика расположения линий. В недавней работе [248] **впервые** поднят вопрос о комбинаторике расположения линий. Оказалось, что p^2+p+1 линий в конечной проективной плоскости $PG(2,p)$, которые эквивалентны друг другу, можно разделить на 2 подмножества. В случае конечной проективной плоскости $PG(2,2)$ это 2 подмножества, состоящие из 3-х (эквивалентных друг другу) и 4-х (эквивалентных друг другу) линий, а в случае конечной проективной плоскости $PG(2,3)$ это 2 подмножества, состоящие из 4-х (эквивалентных друг другу) и 9-ти линий (не все из которых эквивалентны друг другу).

При более детальном рассмотрении результат состоит в следующем. Для $PG(2,2)$, согласно рис.4.1 a , линии l_1, l_5, l_6 и l_7 составляют 1-е подмножество, а линии l_2, l_3 и l_4 , пересекающиеся в точке P_1 , составляют 2-е подмножество; для $PG(2,3)$, рис.4.15 a , эквивалентны 4 линии (1-е подмножество), проходящие через точку 1; их эквивалентность заключается в том, что каждая из этих 4-х линий состоит из 3-х отрезков. Каждая из остальных 9 линий в $PG(2,3)$ (2-е подмножество) состоит из меньшего количества отрезков. Каждому отрезку соответствует знак инцидентности в таблице инцидентности (рис.4.15 b). Например, линия l_1 (1-я строка на рис.4.15 b) состоит из отрезков 2-1, 1-3 и 3-4 (номерами вершин i на рис.4.15 a отвечают точки P_i в таблице инцидентности на рис.4.15 b), а линия l_5 состоит из отрезков 2-5 и 5-11.

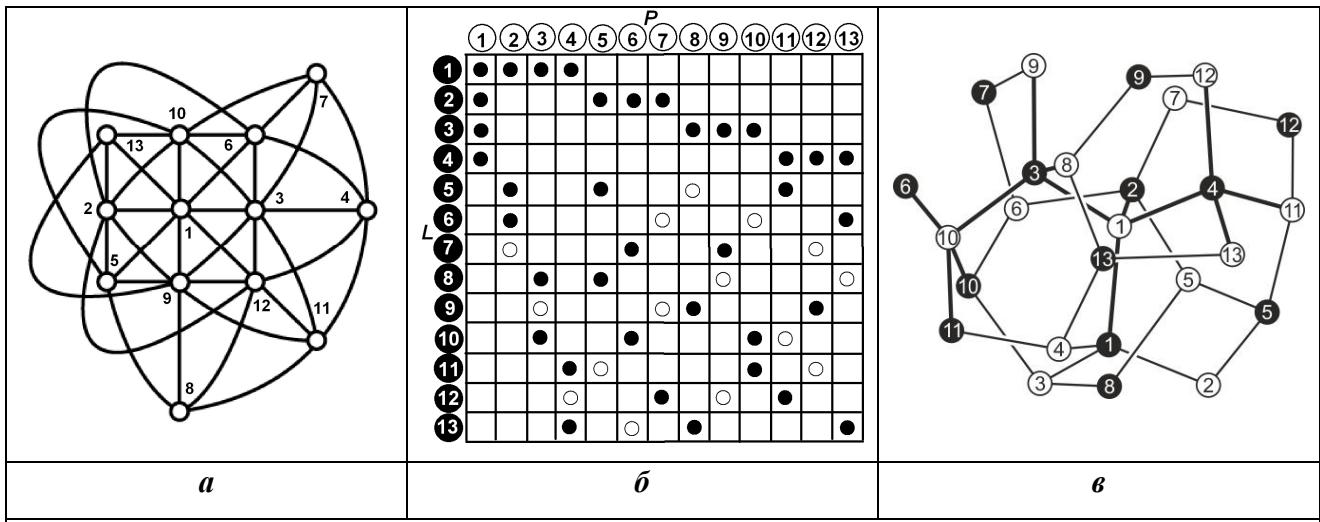


Рис.4.15.

- (*a*) – граф инцидентности $\text{PG}(2,3)$;
- (*б*) – таблица инцидентности $\text{PG}(2,3)$;
- (*в*) – вершинная фигура политопа $\{240\}$ (рис.4.12*а*) без вершины $14'$ (26-вершинный кластер).

Матроиды (комбинаторные предгеометрии). Из таблицы инцидентности рис.4.15*б* можно выделить подтаблицы, однозначно определяющие как составной, так и декорированный тетраблоки. Граф инцидентности $\text{PG}(2,3)$ (рис.4.15*а*) является 13-точечным матроидом с 13 линиями [249, p.39; 250]. Матроидом M называется упорядоченная пара (E, J) , состоящая из конечного множества E и набора J подмножеств E , удовлетворяющих следующим условиям [249, p.8]:

1. $0 \in J$.
2. Если $I \in J$ и $I' \subseteq I$, то $I' \in J$.
3. Если I_1 и I_2 находятся в J , и $|I_1| < |I_2|$, то в разности $I_2 - I_1$ существует элемент e , такой, что $I_1 \cup e \in J$. Условие 3 называется аксиомой прироста (увеличения) независимости.

Если M – это матроид (E, J) , то M называется матроидом на E . Компоненты (члены) J являются независимыми множествами M , а E – базовым множеством M . В частности, декорированному тетраблоку (рис.4.13*б,в*) будет соответствовать так называемый “трансверсальный” матроид [249, p.46].

Помимо описания таких множеств, теория матроидов содержит аппарат, позволяющий выявлять их симметрию, хотя эта задача далеко не тривиальна, поскольку матроид характеризуется не только геометрической симметрией конфигурации точек (симметрией жестких преобразований), но и комбинаторной симметрией (симметрией нежестких преобразований) [251]. Иногда вместо термина “матроид” употребляется термин “комбинаторная предгеометрия” [252 - 254].

Конфигурации 13_4 , 9_4 и их пересечения. Декорированный тетраблок является частью 26-вершинного кластера, определяемого графом инцидентности конечной проективной плоскости $\text{PG}(2,3)$ из 3^2+3+1 точек (рис.4.15 a) или самодуальной конфигурацией 13_4 (это 13 точек и 13 линий, в каждой точке пересекаются 4 линии, на каждой линии 4 точки). Максимальное количество элементов группы симметрии декорированного тетраблока, которые **могут не быть нагруженными** преобразованием “перемены цвета”, должно определяться **пересечением** ТИ конфигурации 13_4 (симметричной конструкции) с ТИ некоторой самодуальной конфигурации n_4 (где $n < 13$) – тоже симметричной конструкции; пересечение “вырезает” часть 26-вершинного кластера. Основанием для этого утверждения служит следующая аналогия: порядок группы (геометрической) симметрии D_{3d} параллелоэдра алмаза (рис.4.2 b) равен 12 (не учитывая вклада комбинаторной симметрии), соответствующая таблица инцидентности представлена на рис.4.1 b ; эта ТИ является **пересечением** таблиц инцидентности самодуальных конфигураций Фано 7_3 (рис.1.2 b , ее ТИ представлена на рис.2 в книге [21], порядок группы равен 168 [199]) и Дезарга 10_3 (рис.1.26, ее ТИ приведена на рис.4.6 a , порядок группы 120 [147]).

Согласно работе [255], подходящими конфигурациями n_4 , в принципе, могут быть конфигурации 7_4 , 8_4 и 9_4 . Однако конфигурации 7_4 и 8_4 в данном случае не подходят, поскольку в них любые две строки пересекаются по двум столбцам (что геометрически определяет 4-вершинный цикл, которого в политопе $\{240\}$ быть не может). Единственной подходящей конфигурацией остается 9_4 (9 точек и 9 плоскостей, в каждой точке пересекаются 4 плоскости, на каждой плоскости 4 точки). В работе [255] приведен список инцидентностей 9-ти точек и 9-ти плоскостей. В соответствии с этим списком (используя также возможность перестановок строк и/или столбцов и присваивания им любых номеров) нами была построена ТИ данной конфигурации 9_4 (рис.4.16 a). Каждый столбец в ней соответствует точке, строка – плоскости, пересечение строки и столбца, отмеченное голубым кружком (знаком инцидентности) означает, что данная плоскость проходит через данную точку.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1												
2												
3												
4												
5												
6												
7												
8												
9												
10												
11												
12												
13												

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1												
2												
3												
4												
5												
6												
7												
8												
9												
10												
11												
12												
13												

1	2	3	4	5	6	7
1						
2						
3						
4						

Рис.4.16.

- (а) – ТИ конфигурации 9_4 : каждый столбец соответствует точке, строка – плоскости, пересечение строки и столбца, отмеченное голубым кружком (знаком инцидентности), означает, что данная плоскость проходит через данную точку.
- (б) – ТИ пересечения конфигураций $13_4 \cap 9_4$, т.е. пересечения ТИ рис.4.15б и ТИ рис.4.16а. Условные обозначения: желтый кружок – имеет место совпадение черного кружка от ТИ рис.4.15б и голубого кружка от ТИ рис.4.16а; розовый кружок – совпадение пустого кружка от ТИ рис.4.15б и голубого кружка от ТИ рис.4.16а.
- (в) – Фрагмент ТИ рис.4.16б, содержащий только желтые кружки (свидетельствующие о совпадениях знаков инцидентности) и имеющий минимальные (но не более 7×7) размеры: это ТИ 4×7 , отвечающая декорированному тетраблоку, представленному на рис.4.13в.

Построим пересечение конфигураций $13_4 \cap 9_4$, т.е. пересечение рис.4.15б и рис.4.16а: в таблицу инцидентности рис.4.15б, содержащую черные и пустые кружки, вставим ТИ рис.4.16а, содержащую голубые кружки, совмещая левый верхний угол обеих ТИ размером 9×9 . Результатом является таблица рис.4.16б; условные обозначения: желтый кружок – место совпадения черного и голубого кружков, розовый кружок – место совпадения пустого и голубого кружков. Выделим из итоговой таблицы рис.4.16б такой фрагмент, который содержит только желтые кружки, свидетельствующие о совпадениях, и имеет минимальные размеры (однако, не превосходящие размер 7×7 – по максимальному числу вершин одного из составляющих тетраблоков). Размеры искомого фрагмента оказались 4×7 (рис.4.16в).

Таблица инцидентности рис.4.16в, действительно, отвечает декорированному тетраблоку (рис.4.13в). Номера белых вершин в ней соответствуют линейному (белому) тетраблоку, который расположен вертикально, в отличие от горизонтального расположения линейного (белого) тетраблока на рис.4.13б. Декорированный тетраблок рис.4.13в содержит семь белых вершин ($1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$) и четыре черные ($1', 2', 3', 4'$). Порядок группы автоморфизмов (группы геометрической симметрии) самодуальной конфигурации 13_4 равен

$13 \cdot 12 \cdot 9 \cdot 4 = 5616$ [256], а самодуальной конфигурации $9_4 - 3! \cdot 3! \cdot 2 = 72$ [255]. Пересечение – это общая подгруппа двух групп (группа автоморфизмов). Известно, что порядок подгруппы не может быть больше порядка группы. Таким образом, максимальное количество элементов группы симметрии декорированного тетраблока из 336, которые **могут не быть нагруженными** преобразованием “перемены цвета”, не превосходит 72, нагруженных – не менее 264.

4.6.2.3. Конструирование “углеводородно-подобных” цепей

Если линейные цепи образованы из одинаковых правильных тетраэдров, объединенных по граням, то в E^3 возможно отображение их “некристаллографической” (“скрытой”) симметрии. Для цепей ограниченной длины оно достигается возможностью их вложения в регулярные тетраэдрические разбиения 3-мерных пространств постоянной положительной (сфера S^3) и отрицательной (H^3) кривизны: в “политоп $\{3,3,5\}$ ” [24, p.153] и в гиперболические соты $\{3,3,6\}$ [196], соответственно. Линейный вариант тетраблока обладает группой симметрии (порядка $2^3 \cdot 3 \cdot 7 = 168$ [121, 127]), изоморфной проективной специальной линейной группе $PSL(2,7)$; последняя изоморфна группе $PSL(3,2)$, - в иных обозначениях это группы $L_2(7)$ и $L_3(2)$ [192, p.x]. Рассмотрим в E^3 линейные цепи, состоящие из конечного числа тетраблоков, которые не имеют общих тетраэдров и однотипно соединены по торцевым ребрам или вершинам. Такие цепи можно привести (преобразуя, при необходимости, неэнантиоморфный вариант тетраблока в энантиоморфный, а также используя имеющиеся степени свободы в местах объединений) к виду спиралей из тетраблоков. Если цепь при этом может быть **строго вложена** в тор из политопа $\{3,3,5\}$, состоящий из 30 тетраэдров (30 вершин такого тора принадлежат трем 10-реберным цепочкам [24, p.247]), то эта цепь будет обладать группой S_8 (симметрической группой степени 8) [209, p.29], являющейся подгруппой группы $2^6:S_8$, где двоеточие означает полуправильное произведение. Группа $2^6:S_8$ – одна из 17 максимальных подгрупп группы $2 \cdot O_8^+(2)$, где $O_8^+(2)$ – группа ортогональных преобразований 8-мерной кристаллографической решетки E_8 [192, p.85; 209]. Действительно, группу S_8 можно представить в виде произведений своих подгрупп, $D_{30} \cdot (2^3:PSL(3,2))$ или $S_3 \times D_{10} \cdot (2^3:PSL(3,2))$ [209, p.29], где символ \times означает прямое произведение; $2^3:PSL(3,2) \equiv AGL_3(2)$, $AGL_3(2)$ – аффинная общая линейная группа [209, p.29]; D_{30} и D_{10} – диэдральные группы; $D_{30} = C_{30}:2$, $D_{10} = C_{10}:2$, где C_{30} , C_{10} – циклические группы порядков 30 и 10, $C_{30} = C_5 \times C_6$. Решетка E_8 имеет группу симметрии, порядок которой (696729600 элементов) максимальен из всех групп отражений, и 120 векторов (из 240) 1-ой координационной сферы решетки E_8 однозначно определяют политоп $\{3,3,5\}$ [231].

Получение спиралей из тетраблоков можно осуществить двумя способами. Если сохранить положения 30 вершин тора, но удалить совокупности из k ребер, равноотстоящие друг от друга по окружности тора, то образуются две спирали [124]:

- (a) при $k = 1$ (всего 6 местоположений ребра в торе) – спираль из 6 линейных тетраблоков, соединенных по торцевым **ребрам** (в политопе $\{3,3,5\}$ это соединение возможно для цепей из ≤ 6 тетраблоков);
- (б) при $k = 3$ (всего 5 местоположений ребер в торе) – спираль из 5 линейных тетраблоков, соединенных по торцевым **вершинам** (в политопе $\{3,3,5\}$ это соединение возможно для цепей из ≤ 5 тетраблоков). В варианте (б) пять центров тетраблоков и пять общих для соседних тетраблоков торцевых вершин образуют одну сохранившуюся 10-реберную цепочку тора.

Итак, эти спирали из 6 и 5 линейных тетраблоков обладают симметрией, как минимум, подгрупп $C_6 \cdot PSL(3,2)$ и $C_5 \cdot PSL(3,2)$ группы $((C_5 \times C_6) : 2) \cdot (2^3 : PSL(3,2))$, соответственно. Симметрия решетки E_8 такова, что 240 векторов ее 1-ой координационной сферы могут быть разбиты на 8 подмножеств по 30 векторов [231; p.39] (1-й вариант) или на 10 подмножеств по 24 вектора [25] (2-й вариант). Для определения симметрии спиралей из тетраблоков необходимо найти максимальные надгруппы для группы $PSL(3,2)$, которые вкладываются в группу симметрии решетки E_8 в соответствии с этими вариантами. Такое вложение гарантирует необходимую тетраэдрическую геометрию системы: E_8 позволяет построить политоп $\{3,3,5\}$. В частности, максимальная подгруппа $2^4 : A_8$, - одна из 9 максимальных подгрупп группы Матье M_{24} [192, p.96], содержащая $PSL(3,2)$, вкладывается в подгруппу $2^6 : S_8$ группы E_8 по 1-му варианту [192, p.85]; это привело к рассмотренным спиралям из 6 и 5 тетраблоков. Другая максимальная подгруппа группы M_{24} , - трионная $2^6 : (PSL(3,2) \times S_3)$, определяет симметрию, соответствующую 2-му варианту.

Использование линейных тетраблоков, соединенных по торцевым вершинам. Рассмотрим вариант (б) более подробно. Как уже указано, удаление 5 равноотстоящих друг от друга троек ребер из тора оставляет 20 из 30 тетраэдров, что дает спираль из 5 линейных 7-вершинных тетраблоков (содержащих $5 \cdot 4 = 20$ тетраэдров), соединенных по торцевым вершинам [124]. Переход в S^3 от такой замкнутой **тетраблочной** спирали к соответствующей ей замкнутой **тетракоординированной** цепи осуществляется переходом от линейных (7-вершинных) тетраблоков к *составным* (14 – вершинным) тетраблокам [131, 132], рис.4.13a, объединенным совмещением **пар** торцевых вершин (*составные* тетраблоки следует рассматривать как объекты с “проницаемыми” гранями). При объединении двух *составных* тетраблоков совмещаются 4 торцевые вершины – по одной от “белых” линейных тетраблоков, и по одной – от “черных” линейных тетраблоков, т.е. совмещаются 2 белые и 2

черные вершины, а на месте стыковки остаются 2 вершины вместо 4-х. Количество составных тетраблоков в этой **замкнутой** цепи равно 5, и количество ее вершин равно $14 \cdot 5 - 2 \cdot 5 = 60$. Высокосимметричной структурой, содержащей такую цепь (“охватывающей” конструкцией), является политоп {240}. Хотя политоп {240} содержит замкнутую цепь из 5 **составных** тетраблоков, но группа симметрии этой цепи определяется произведением групп $D_5 \cdot PSL(2,7)$, не принадлежащим группе симметрии политопа (число элементов в D_5 равно 10; порядок группы симметрии замкнутой цепи из 60 вершин равен $10 \cdot 168 = 1680$). Политоп {240} можно представить в виде трех 60-вершинных тетракоординированных цепей и двух 30-вершинных геликоидов Бердийка-Коксетера [134] (раздел 4.5.2). Реализация цепи зависит от типов атомов, которые окажутся в вершинах. Например, если это атомы углерода C и водорода H , то это отвечает насыщенной “углеводородно-подобной” цепи вида $C_{20}H_{40}$, которая соответствует **замкнутой** тетракоординированной цепи в политопе {240}. Отметим, что атомы помещаются в вершины вне зависимости от их цвета, – только в соответствии со **структурой** цепи, которую образуют вершины, т.е. атомы C и H могут занимать как “черные”, так и “белые” вершины.

Актуальным является вопрос о переходе от **замкнутой** к **незамкнутой** цепи. Было показано [116, 117], что при отображении тетракоординированных цепей из политопа {240} в E^3 наивысшей некристаллографической симметрией обладает 48-вершинная **незамкнутая** цепь. Основные этапы доказательства этого утверждения состоят в следующем. Количество элементов симметрии 120 вершин политопа {3,3,5} равно $2^6 \cdot 3^2 \cdot 5^2 = 14400$; в политопе {240} теряется одна из осей 5-го порядка, и количество элементов равно $2^6 \cdot 3^2 \cdot 5 = 2880$ [6, 24]. Если же осуществить единообразно, в строго определенных направлениях, бесконечно малые смещения 96 вершин политопа {3,3,5} из 120, то итоговая система из $120 = (24+96)$ вершин будет обладать группой симметрии (содержащей уже 110592 элементов) подсистемы $(D_4)^2$ 8-мерной системы векторов E_8 [257]. Если разбиение (24+96) затем удвоить по аналогии с “политопом {240}”, то группа для суммы вершин (48+192) будет иметь порядок 221184, т.к. в данной системе оси 5-го порядка не было [257]. При этом в системе (48+192) конформации всех гексациклов [6] останутся бесконечно близкими к исходным (“скрученная ванна”). Количество элементов симметрии, однако, резко возросло (в $221184 / 2880 = 76.8$ раза). Максимум количества элементов симметрии – это максимум количества вариантов отображения системы (48+192) на себя, т.е. энтропии; этим достигнут более глубокий, чем в политопе {240}, минимум свободной энергии (минимум энталпии обеспечен конформацией “скрученная ванна” всех гексациклов).

Известно [24, p.153, p.298], что политоп {3,3,5} можно представить также состоящим из 24 икосаэдров и 24 вершин в их центрах. Упомянутые 96 вершин охватываются 8

икосаэдрами, которые не пересекаются [24, p.298, Table V(i)]. Три пары таких икосаэдров ($2 \cdot 12 = 24$ вершины в каждой) преобразуются осью 3-го порядка друг в друга, образуя единую систему из $3 \cdot 2 \cdot 12 = 72$ вершин (а два икосаэдра отображаются осью сами на себя) [24, p.298, Table V(i)]; единство этой системы и определяет возможность непрерывно и однородно заполнить область в E^3 . Упомянутые 72 вершины политопа $\{3,3,5\}$ при переходе бесконечно малыми смещениями к системе $(24+96) = (24+12+72+12)$ вершин могут быть представлены как три 24-вершинные цепи, которые преобразуются друг в друга осью 3-го порядка C_3 . Группа симметрии каждой из цепей изоморфна трионной подгруппе $2^6:(PSL(3,2) \times S_3)$ группы Матье M_{24} [192; p.96] (символы “ \times ” и “ $:$ ” означают, соответственно, прямое и полуправильное произведения), где $PSL(3,2)$ (в иных обозначениях $PSL(2,7)$) – проективная специальная линейная группа (порядка 168), S_3 – симметрическая группа степени 3). Порядок трионной подгруппы 64512 [192; p.96], т.е. порядок группы симметрии всех трех цепей равен 193536.

Нами показано, что искомой является подсистема из $2 \cdot 72 = 144$ вершин (она является единственной), группа ее симметрии имеет порядок $2 \cdot 193536 = 387072$: это 3 совокупности по 48 вершин; они представимы в виде трех тетракоординированных “углеводородно-подобных” цепей (вида “ $C_{16}H_{32}$ ”). Эти три совокупности по 48 вершин переводятся друг в друга осью 3-го порядка C_3 , поэтому порядок группы симметрии каждой цепи равен $387072 / 3 = 129024$. Итак, **незамкнутая** часть вида “ $C_{16}H_{32}$ ” **замкнутой** тетракоординированной (“углеводородно-подобной”) цепи вида “ $C_{20}H_{40}$ ” в политопе $\{240\}$ (порядок ее группы равен 1680) обладает большим порядком группы симметрии в $129024 / 1680 = 76.8$ раза. Поэтому эта 48-вершинная цепь является “идеальным прототипом” для реализации. При отображении в E^3 три цепи “ $C_{16}H_{32}$ ” скручены в виде спиралей (подобно геликоидам Бердийка-Коксетера [24]) в “цилиндрический тройник” [117].

С другой стороны, если составить **незамкнутую** цепь из 4-х составных 14-вершинных тетраблоков, объединенных по парам торцевых вершин, то в 3-х областях стыковки останутся 6 вершин вместо 12-ти; общее количество вершин цепи равно $14 \cdot 4 - 2 \cdot 3 = 50$. Это насыщенная цепь $C_{16}H_{34}$, т.е. цепь вида “ $C_{16}H_{32}$ ”, дополненная 2-мя вершинами – по одной с каждого торца.

Можно утверждать, что *составной* тетраблок, как таковой, **способен** играть роль “идеального прототипа” для каждого 14-вершинного участка цепи (т.к. порядок его группы равен $168 \cdot 2 = 336$), а также породить, объединением этих тетраблоков по торцевым вершинам, высокосимметричные тетракоординированные цепи в целом. Для 4-х *составных* тетраблоков этот способ такую цепь (“ $C_{16}H_{34}$ ”) получить позволил. В тех же случаях, когда

количество составных тетраблоков в цепи не равно 4-м, высокая симметрия, как уже упомянуто, есть в каждом ее участке вдоль по цепи, в рамках 14-вершинных фрагментов.

Использование линейных тетраблоков, соединенных по торцевым ребрам. Обратимся теперь к варианту **(а)** – случаю, когда мы сохраняем положения 30 вершин тора из 30 тетраэдров в политопе {3,3,5}, но удаляем по одному ребру, равноотстоящему друг от друга ($k = 1$), – всего 6 ребер. При этом мы оставляем 24 из 30 тетраэдров, что дает **замкнутую** в тор спираль из 6 линейных 7-вершинных тетраблоков (содержащих $6 \cdot 4 = 24$ тетраэдра), соединенных по торцевым **ребрам** [124]. Группа симметрии цепи из линейных тетраблоков, соединенных по ребрам, равна, как минимум, $6 \cdot 168$ (поскольку, согласно [192; 16, с.337; 209, р.11, п.29], она больше – равна $6 \cdot 2^3 \cdot 168$).

Перейти от замкнутой **тетраблочной** спирали (состоящей из линейных тетраблоков, соединенных по торцевым **ребрам**) к замкнутой и полностью **тетракоординированной** цепи, используя составные тетраблоки, невозможно, поскольку это не соответствует структуре политопа {240}. Однако если перейти от шести линейных (7-вершинных) тетраблоков к шести **декорированным** (11 – вершинным) тетраблокам [132] (рис.4.13б,в), соединенным по торцевым ребрам, то замкнутая спираль может быть вложена в политоп {720} [26], который содержит все вершины политопа {240}. В ней достигается симметрия, которая в каждом ее 11-вершинном фрагменте отвечает симметрии политопа {240}, о чем свидетельствует процедура получения декорированного тетраблока в разделе 4.6.2.2.

Рассмотрим одну из шести областей “стыковки” декорированных тетраблоков (рис.4.17а) в замкнутой спирали из шести тетраблоков. Номера белых вершин тетраблока, расположенного на рис.4.17а слева, будем обозначать цифрами обычного шрифта, а черные вершины – такими же цифрами со штрихом; при этом белые и черные вершины тетраблока, расположенного справа, будем обозначать аналогично цифрами **жирного** шрифта.

При стыковке декорированных тетраблоков по торцевым ребрам совмещаются ребра белых линейных тетраблоков: на рис.4.17а это означает совмещение вершины 13 и **10**, а также 11 и **8**. Во всех декорированных тетраблоках, как показано выше, торцевые тетраэдры белых линейных тетраблоков (рис.4.13б,в) центрированы черными вершинами. Слева белый тетраэдр 1, 8, 9, 10 центрирован черной вершиной 3', а белый тетраэдр 1, 11, 12, 13 – черной вершиной 4'; справа белый тетраэдр **1, 8, 9, 10** центрирован черной вершиной **3'**, а белый тетраэдр **1, 11, 12, 13** – черной вершиной **4'**. После указанного совмещения вершин (13 с **10**, и 11 с **8**) угол, образуемый каждой из двух белых вершин, 13(**10**) и 11(**8**), торцевого ребра и двумя ближайшими к ним черными вершинами (это угол 4'-13(**10**)-3' и/или угол 4'-11(**8**)-3'),

очевидно, не является тетраэдрическим. По этой причине белые вершины торцевого ребра 13(10) и 11(8) заведомо не могут оказаться в центрах каких-либо тетраэдров из черных вершин, а это нарушает исходные требования, обусловленные поиском возможно большей симметрии линейной структуры (которая для этого должна быть тетракоординированной или кусочно-тетракоординированной). Поиск возможности выделения фрагмента с более высокой симметрией приводит к необходимости исключения из искомой структуры **обеих вершин общего торцевого ребра** каждого тетраблока, т.е. вершин 13, 10, 11, 8. В объединении двух декорированных тетраблоков вершинами, расположенными наиболее близко друг от друга, оказываются 2 черные вершины, центрирующие белые торцевые тетраэдры – это вершины 4' и 3'. Если каждую из этих черных вершин соединить связями с двумя оставшимися белыми вершинами своего тетраэдра, то соответствующие углы 1-4'-12 и 1-3'-9 будут тетраэдрическими.

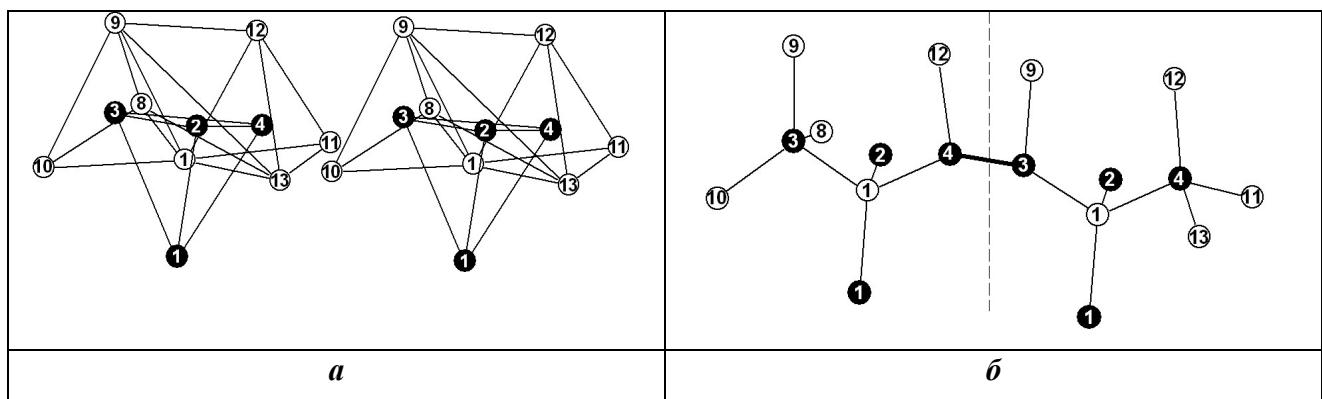


Рис.4.17.

(*a*) – Одна из шести областей “стыковки” по торцевым ребрам (13–11 и 10–8) двух декорированных тетраблоков в замкнутой **тетраблоочной спирали** (содержащей 6 таких тетраблоков).

(*б*) – Объединение двух декорированных тетраблоков (граница между ними обозначена вертикальным пунктиром). При переходе к цепи следует удалить все ребра между вершинами тетраблоков и ввести максимально возможное число тетраэдрических связей между вершинами при сохранении их местоположений; в итоге формируется цепь с **плоским** фрагментом в областях стыковки. При объединении шести декорированных тетраблоков в замкнутую спираль между каждым плоским фрагментом будет локализована группа из трех вершин 1, 1', 2' (или 1, 1', 2').

“Слияние” двух таких тетраблоков можно осуществить лишь введением связи между черными вершинами 4' и 3'. Эта связь перпендикулярна торцевому (исключенному) ребру 13(10) – 11(8) двух белых тетраблоков и принадлежит перпендикулярной этому ребру плоскости, проходящей через его середину (рис.4.17*б*, связь 4' – 3' выделена жирной линией). В этой же плоскости лежат и обе связи, соединяющие каждую из двух

рассматриваемых черных вершин с двумя белыми вершинами своего тетраэдра, т.е. всего четыре связи: 1–4', 4'–12, 1–3', 3'–9. Объединение двух рассматриваемых черных (4' и 3') и четырех белых (1, 12, 9, 1) вершин формирует в итоге **плоский** фрагмент (рис.4.17б).

В этом плоском фрагменте тетраэдрическая (T_d) симметрия не достигается, но возникает симметрия ромбическая (C_{2v}). Конкретная реализация фрагмента зависит от типов атомов, которые окажутся в вершинах. Например, если в вершины (как белые, так и черные), образующие остов цепи, поместить атомы углерода C , а в боковые вершины – атомы водорода H , то данный плоский фрагмент отвечает плоской структуре с двойной связью “ $C - CH = CH - C'$ ” в участке “ $CH_2 - CH = CH - CH_2$ ” ненасыщенной углеводородной цепи. Высокосимметричной структурой, содержащей такую цепь, является полигоп {720}, представляющий собой 120-вершинный полигон {3,3,5}, в котором центрированы все 600 тетраэдров [26]; порядок его группы симметрии равен 14400.

Для того чтобы данный плоский фрагмент мог реализоваться в некоторой молекулярной системе, необходимо (в соответствии с концепциями, описанными в главе 2), чтобы “идеальным прототипом”, обладающим высокой симметрией, оказался 9U2-вершинный фрагмент, образовавшийся после удаления двух торцевых вершин у каждого декорированного (11-вершинного) тетраблока (рис.4.17а). Отмечалось (глава 2), что факт существования “идеального прототипа” является необходимым (хотя и не достаточным) условием для его реализации в конкретных молекулярных системах, аналогично роли федоровских (пространственных) групп для идеальных кристаллов. Пользуясь снова законом сохранения симметрии для квазизолированных систем (диссимметризация системы на одном уровне структуры компенсируется симметризацией на другом – так, что при этом первоначальные группы симметрии сохраняются на абстрактном уровне, преобразуясь в группы обобщенной (цветной) симметрии, изоморфные исходным [243, с.57; 206]), можно утверждать, что симметрия 9U2-вершинного фрагмента, как и 11-вершинного, является высокой: группа цветной симметрии изоморфна группе $PSL(2,7) \cdot C_2$, ее порядок 336. Итак, 9U2-вершинный фрагмент может играть роль идеального прототипа.

Рассмотрим исходную **замкнутую** спираль из шести *декорированных* тетраблоков, объединенных по торцевым ребрам. При удалении пар вершин **обоих** торцевых ребер каждого тетраблока она преобразуется в замкнутую цепь с шестью плоскими фрагментами, а между каждой парой плоских фрагментов локализована группа из трех вершин 1, 1', 2' (или 1, 1', 2'), рис.4.17. Если заместить вершины остова цепи, например, атомами углерода C , а остальные вершины – атомами водорода H , то очевидно, что такая цепь является цепью с шестью “метиленпрерывающимися” двойными связями [136], т.е.

$$(CH = CH - CH_2)_6.$$

Цитированный выше закон сохранения симметрии [243, с.57; 206] и использование группы обобщенной (цветной) симметрии, *изоморфной* исходной группе 11-вершинного декорированного тетраблока, позволяет вести речь о том, что высокую симметрию имеет не только $9 \cup 2$ -вершинный, но и $2 \cup 7 \cup 2$ -вершинный фрагмент. Последний образуется, когда удалены четыре торцевых вершины у каждого 11-вершинного декорированного тетраблока; он может служить “идеальным прототипом” для каждого из шести участков такой цепи. Это – обоснование широкой распространенности такого расположения двойных связей в жирнокислотных цепях фосфолипидов биомембран, когда между каждой их парой содержится только одна метиленовая группа CH_2 [167, 245-247].

Если декорированные тетраблоки объединены по **торцевым ребрам**, и один из тетраблоков оказывается **концевым** в цепи, то при “*C*”–“*H*” реализации структуры концевой фрагмент приобретает вид “= $CH - CH_2 - CH_3$ ”, т.е. двойная связь имеет положение **ω3** (рис.4.17б). Итак, обоснованием высокой вероятности именно такого расположения двойной связи в цепи (т.е. широкой распространенности **ω3**-жирнокислотных цепей в фосфолипидах биомембран [167, 245-247]) является существование “идеального прототипа”: это упомянутый выше 9-вершинный фрагмент (“остаток” декорированного тетраблока) [135].

Объединим два *декорированных* тетраблока по двум **торцевым вершинам**: черную вершину 1-го тетраблока (считая справа налево) – с белой вершиной 2-го тетраблока, а белую вершину 1-го тетраблока – с черной вершиной 2-го тетраблока. Затем исключим 2 совмещенные вершины из общего их количества и объединим эту пару тетраблоков с третьим *декорированным* тетраблоком по **торцевому ребру**, исключим 2 вершины этого ребра у второго тетраблока (у третьего тетраблока две вершины торцевого ребра также исключаются, но для подсчета количества вершин концевого фрагмента из двух тетраблоков это несущественно). Фрагмент из 1-го и 2-го тетраблоков, пристыкованных к третьему, содержит 18 вершин ($11 + 11 - 2 - 2 = 18$).

Если, аналогично предыдущему случаю, осуществить “*C*”–“*H*” реализацию этой конфигурации вершин, то получим фрагмент “= $CH - CH_2 - (CH_2)_3 - CH_3$ ”. Он содержит двойную связь, расположенную в положение **ω6** (т.е. первый атом углерода, участвующий в образовании двойной связи, расположен в 6-м положении от CH_3 -группы, считая первым атом углерода CH_3 -группы) [135]. Таким образом, высокая степень распространенности **ω6**-расположения двойной связи в жирнокислотных цепях фосфолипидов биомембран [167, 245-247] обусловлена тем, что этот фрагмент цепи есть реализация результатастыковки двух высокосимметричных “идеальных прототипов”: 11-вершинного декорированного тетраблока и его $9 \cup 2$ -вершинного “остатка”.

4.7. Вторая координационная сфера алмазоподобной структуры и таблица инцидентности PG(2,3)

Для всех (идеальных) АС вторая координационная сфера состоит из объединения 4-х центрированных тетраэдров, поэтому АС различаются торсионными углами, определяемыми вращениями 4-х троек атомов второй координационной сферы. Если эти 12 вершин образуют архимедов кубооктаэдр, то АС – алмаз ($\Theta = 60^\circ$); если они образуют гексагональный кубооктаэдр, то АС – лонсдейлит ($\Theta = 60^\circ, 0$); если образуются оба эти 12-вершинника, то АС – полисинтетический двойник [13]. Если 4 тройки архимедова кубооктаэдра начинают синхронно вращаться на угол ψ , то кубооктаэдр переходит в косой икосаэдр (КИ) с группой симметрии T , а торсионный угол Θ становится равным $60^\circ - \psi$. В работе [258] был построен график изменения расстояний от вершины косого икосаэдра до остальных 11 вершин в зависимости от $\Theta = 60^\circ - \psi$. Синхронное вращение всех троек обеспечивает сохранение подгруппы T , поэтому достаточно рассмотреть зависимость от Θ длин сторон и диагоналей лишь квадрата ABCD из исходного архимедова кубооктаэдра (рис.4.18a). Если сторону квадрата (длиной 2.52 Å) принять за $a = \sqrt{\tau + 2} / 2 = 0.951$ – отношение расстояния от центра до вершины икосаэдра к его ребру, то справедливы соотношения:

$$AB(\Theta) = CD(\Theta) \geq a = AD = BC, \quad BD(\Theta) \leq \sqrt{a} \leq AC(\Theta), \quad (4.14)$$

равенство в которых достигается при $\Theta = 60^\circ$ (рис.4.18б). При $\Theta < 60^\circ$ тройки точек смещаются в вершины косого икосаэдра [13], 20 треугольных граней которого разбиваются на 3 класса:

$$Y_h = \bigcup_{i=1}^3 T \cdot g_i \cdot C_{3v}, \quad T \cap C_{3v} = C_3, \quad n_i = |T| : |T \cap g_i \cdot C_{3v} \cdot g_i^{-1}|, \quad (4.15)$$

где $n_1 = 4$ правильных треугольника со стороной a , $n_2 = 4$ – число правильных треугольников со стороной $AB(\Theta)$, $n_3 = 12$ треугольников со сторонами: a , $AB(\Theta)$, $BD(\Theta)$ или a , $AB(\Theta)$, $AC(\Theta)$.

Если $AB(\Theta) = BD(\Theta)$ или $BD(\Theta) = a$, то в таком косом икосаэдре будут 12 равнобедренных треугольников и две четверки правильных, но не конгруэнтных треугольников. В прямом икосаэдре 8 правильных треугольников конгруэнтны [13]; таким образом, рассматриваемый косой икосаэдр логично назвать косо-прямой икосаэдр (КПИ).

При $\Theta_1 = 38.52^\circ$ $AB = BD = 1.085a \approx 1.032$ и КИ = КПИ; при $\Theta_2 \approx 37.0^\circ$ все 5 вторых

расстояний (от вершины A) становятся приблизительно равными AC. При $\Theta_i = 37.76^\circ$ стартовая точка A попадает на плоскость симметрии группы икосаэдра Y_h и наиболее близка к направлению $[\tau, 0, 1]$ его оси C_5 . Значения Θ_1 и Θ_2 отличаются на $\pm 0.76^\circ$ от Θ_i , поэтому (как и в [258]) будем считать, что при синхронном вращении четырех троек на угол Θ наиболее близким к икосаэдру (в котором все ребра равны 1, а вторые расстояния – τ) является КИ($\Theta \approx 37.76^\circ$) = КИ $_i$. Если O - центр КИ($\Theta \approx 43.9^\circ$), то A, O, C - три вершины “экваториального” пентагона AOCEF пентагональной бипирамиды с полюсами B и D (расположенными на ее оси) и длинами ребер a и l (рис.4.18a).

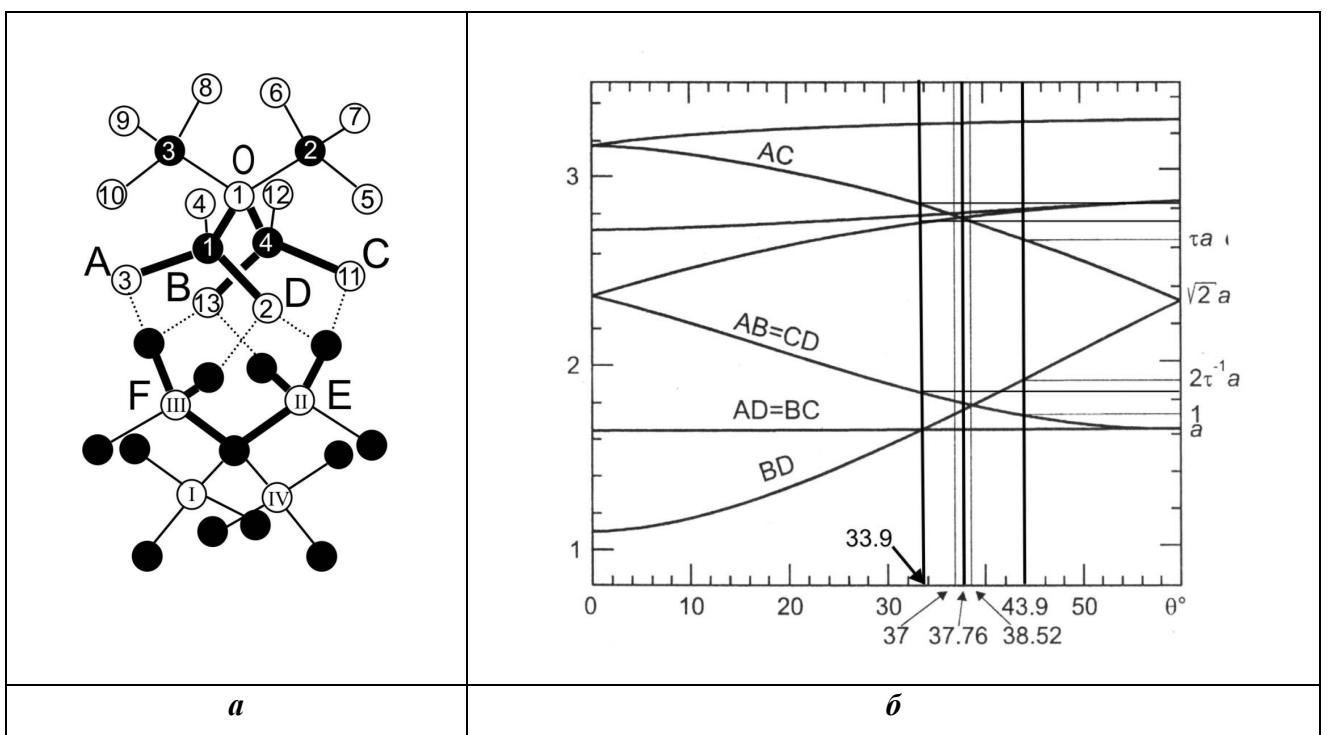


Рис.4.18. Вторая координационная сфера алмаза в зависимости от изменения торсионных углов:

(а) Синхронное вращение на угол ψ четырех троек атомов второй координационной сферы алмаза приводит к изменению расстояний между вершинами A и B, A и C, B и D. Синхронное вращение троек вершин на $\psi = 16.1^\circ$ в двух вторых координационных сферах алмаза приводит к образованию особого 14-вершинного кластера (рис.4.4б), ребра которого показаны жирными и пунктирными линиями;

(б) График изменения расстояний во второй координационной сфере алмаза (а) в зависимости от угла $\Theta = 60^\circ - \psi$ при синхронном вращении на ψ всех четырех троек атомов второй координационной сферы алмаза. Вершины A, B, C, D указаны на (а), при $\theta = 38.52^\circ$ возникает “косо-прямой” икосаэдр (18 и 12 равных между собой ребер); при $\Theta = 37.76^\circ = (37 + 0.76)^\circ = (38.52 - 0.76)^\circ$ (или $\psi = 22.24^\circ$) косой икосаэдр наиболее близок к икосаэдру [258].

Во всех AC 17-вершинник второй координационной сферы определяется ТИ 13×4 , являющейся подтаблицей $PG(2,3) = 13_4$ (рис. 4.19а). Следовательно, максимальная подконфигурация $PG(2,3)$, граф инцидентности которой определяет кластер AC, должна быть получена из некой регулярной 26-вершинной карты. Такой картой является карта

$\{6,3\}_{3,1}$ на торе с 39 ребрами и 13 гексациклями. Отбросив в ней ручку (аналогично отбрасыванию ручки в карте $\{6,3\}_{2,1}$, получим нерегулярное разбиение сферы на $13 - 1 = 12$ гексагонов, разделенных $39 - 3 = 36$ ребрами. В подтаблице 13×4 ТИ PG(2,3) точка P_1 – тетракоординированная, и ТИ искомой подконфигурации должна содержать $36 + 1 = 37$ знаков инцидентности, а знак в 1-ом столбце 1-ой строки должен соответствовать внутреннему, 37-му ребру кластера АС.

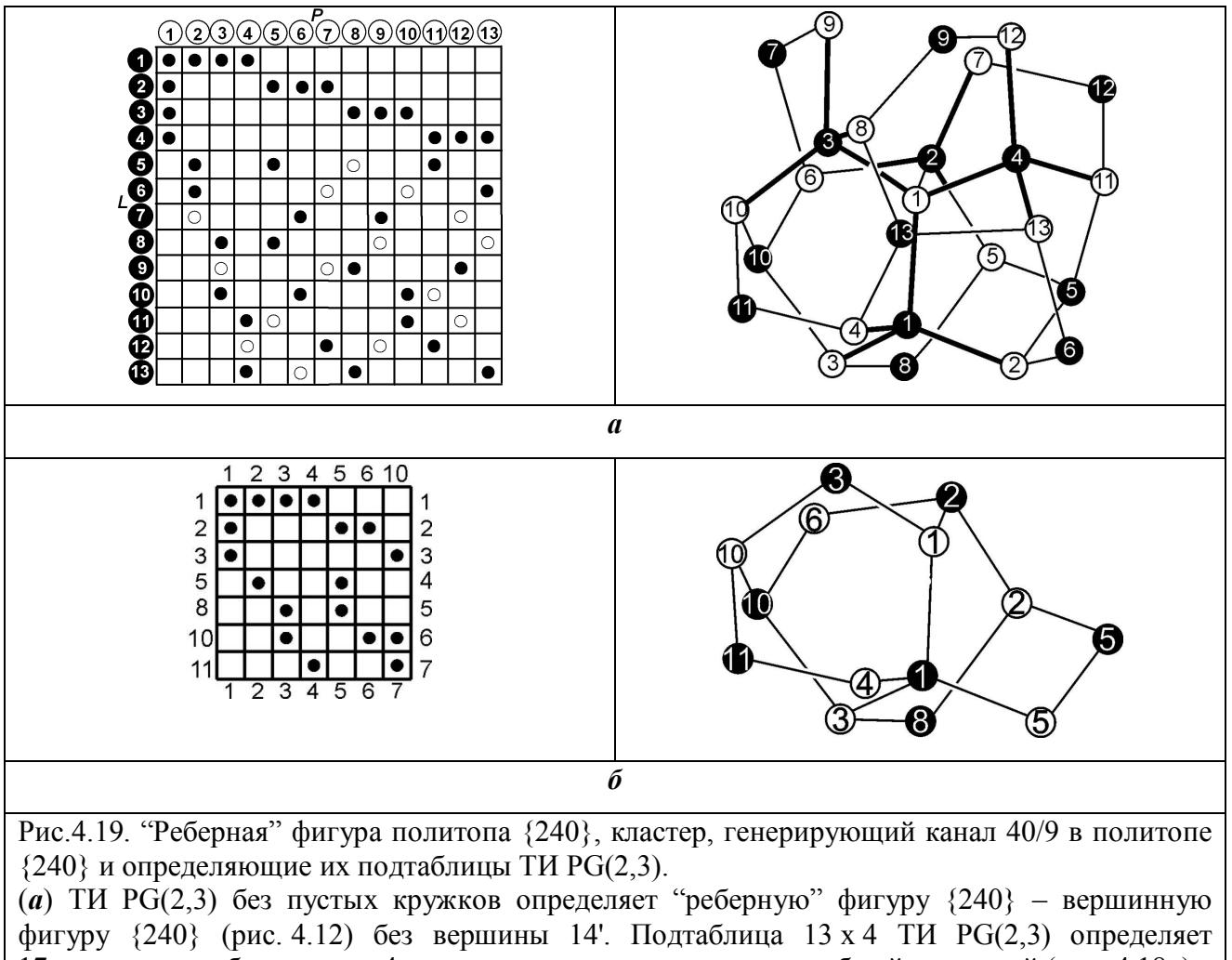


Рис.4.19. “Реберная” фигура политопа $\{240\}$, кластер, генерирующий канал 40/9 в политопе $\{240\}$ и определяющие их подтаблицы ТИ PG(2,3).

(*a*) ТИ PG(2,3) без пустых кружков определяет “реберную” фигуру $\{240\}$ – вершинную фигуру $\{240\}$ (рис. 4.12) без вершины 14'. Подтаблица 13×4 ТИ PG(2,3) определяет 17-вершинное объединение 4-х центрированных тетраэдров с общей вершиной (рис. 4.18*a*). (*b*) Подтаблица ТИ $\tilde{10}_3^4$ определяет кластер, генерирующий канал 40/9 в $\{240\}$. Слева и сверху от ТИ указаны номера строк и столбцов из ТИ $\tilde{10}_3^4$.

4.7.1. Порождающие кластеры алмазоподобных структур, определяемые подтаблицами PG(2,3)

Если в ТИ PG(2,3) выделить подтаблицу 13×4 , а в оставшейся части 13×9 отбросить $52 - 37 = 15$ знаков инцидентности, полученная ТИ будет максимальной подконфигурацией PG(2,3), определяющей особый кластер АС, собранный из гексациклов. Условие сборки

указанного кластера из гексациклов (отсутствие торчащих связей и однокоординированных вершин) требует, чтобы в каждой строке (столбце) подтаблицы 13×9 отбрасывалось не более двух знаков инцидентности. Всем условиям удовлетворяет единственная подконфигурация, а именно $\{13_4\}^{15}$ плоскости $PG(2,3)$, однозначно определяющая 26-вершинный кластер АС (рис. 4.19 a). Данный кластер представляет собой объединение трех ячеек $\{6,3\}_{2,1}^{3(2)}$ (рис. 4.20 a, b) политопа $\{240\}$ вокруг общего, внутреннего ребра $1-1'$, т.е. “реберную фигуру” политопа $\{240\}$, в которой белые вершины 2–13 образуют икосаэдр, кластер можно рассматривать и как вершинную фигуру политопа $\{240\}$ (рис. 4.20 c) без вершины $14'$ [6].

Помимо подконфигурации $\{13_4\}^{15}$ в $PG(2,3)$ могут быть выделены и иные конфигурации, также определяющие 26-вершинные кластеры АС. Такие 26-вершинные кластеры, соответствующие лонсдейлиту и двойникам алмаза с лонсдейлитом, определяются немаксимальными подконфигурациями $PG(2,3)$: $\{13_4\}_1^{21-3}$ и $\{13_4\}_2^{21-3}$, возникающими при отbrasывании 21 и добавлении 3 (отмеченных крестиками) знаков инцидентности в ТИ 13_4 . Отметим, что если к 26-вершинному кластеру лонсдейлита добавить вершину $14'$, то образуется звезда Делоне (вершины 1) лонсдейлита, которая может быть трансформирована (переброской связей) в вершинную фигуру политопа $\{240\}$ [6].

Следовательно, в $PG(2,3)$ могут быть выделены подконфигурации, реализующие 26-вершинные разбиения сферы на гексацикли, которые однозначно определяют особые кластеры АС. Среди всех этих подконфигураций существует лишь одна максимальная, целиком вкладывающаяся в ТИ $PG(2,3)$ при отbrasывании минимума знаков инцидентности. Определяемый ею кластер АС является реберной фигурой политопа $\{240\}$, содержащей икосаэдр, образованный вершинами второй координационной сферы центральной точки. Плоскость $PG(2,3)$ содержит полную расширенную конфигурацию Дезарга $\widetilde{10}_3^4$ [21]. Подконфигурация $PG(2,3)$, задаваемая пересечением $\{13_4\}^{15} \cap \widetilde{10}_3^4 = \{\widetilde{10}_3^4\}^6$, определяет 20-вершинный кластер АС [6] с одним внутренним ребром (рис. 4.20 d), который можно обозначить как слоевую часть реберной фигуры политопа $\{240\}$ (рис. 4.20 d).

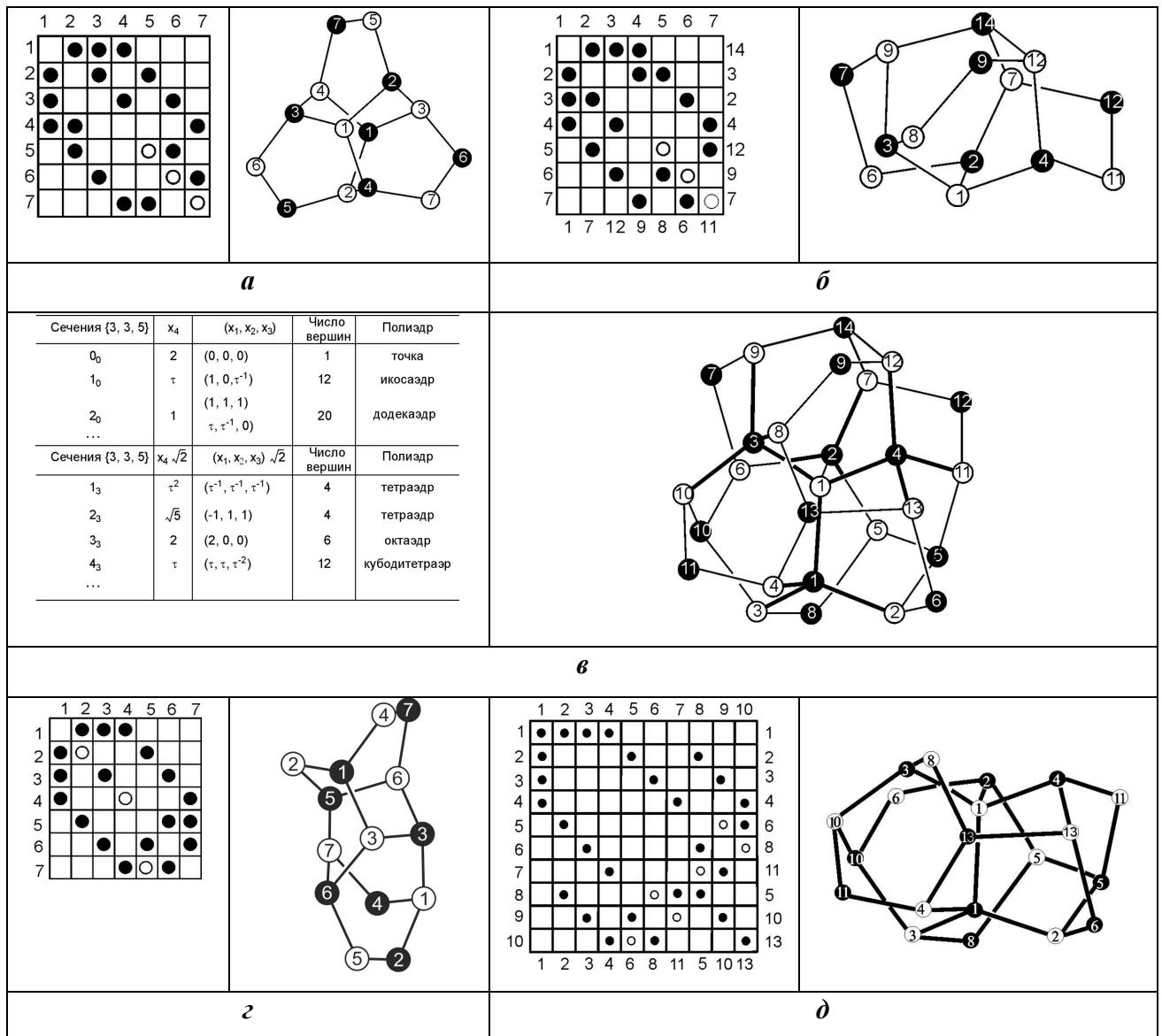


Рис. 4.20. Вершинная фигура “правого” политопа $\{240\}$ и ее части, определяемые ТИ соответствующих подконфигураций.

- (а) Ячейка “левого” политопа $\{240\}$, определяемая подконфигурацией 7_3 , ТИ которой представляет собой ТИ 7_3 без набора из 3-х пустых кружков.
- (б) Ячейка “правого” политопа $\{240\}$, определяемая ТИ а), в которой произведена замена строк на столбцы (корреляция). Номера соответствующих вершин кластера г) указаны справа и снизу от ТИ.
- (в) Вершинная фигура “правого” политопа $\{240\}$ как объединение 4-х ячеек (б). Вершины 1, 2–13 и 1'–4'; 5', 10', 13', 14'; 6', 7', 8', 9', 11', 12' (цифры со штрихами нумеруют черные вершины) соответствуют приведенным в табл. 5 из работы [24] сечениям 0_0 – 1_0 и 1_3 – 3_3 политопа $\{3,3,5\}$ гиперплоскостью E^3 . Сечения n_0 и n_3 начинаются соответственно с вершины и ячейки $\{3,3,5\}$.
- (г) Кластер, генерирующий многоугольник Петри “правого” политопа $\{240\}$, который состоит из белой и черной спиралей Бернала. Объединяющая эти спирали двойная ось проходит перпендикулярно середине ребра 3–3'. Кластер определяется ТИ 7_3 без 3-х пустых кружков, знаниоморфной модификации соответствует замена строк на столбцы.
- (д) Слоевая часть кластера (г), определяемая ТИ расширенной конфигурации Дезарга 10_3^4 без пустых кружков. Справа и снизу от ТИ указаны номера соответствующих строк и столбцов из содержащей ее ТИ $PG(2,3)$ (рис. 4.15б).

4.7.2. Взаимные трансформации 14–вершинных порождающих кластеров алмазоподобных структур

В данном разделе будет показано, что взаимная трансформация 14–вершинных порождающих кластеров алмазоподобных структур определяется симметриями конфигурации Фано.

Осуществляемое $\text{PG}(2,q)$ выделение подгрупп симметрической группы S_n , $n = q^2+q+1$ возможно и в рамках теории геометрических графов. Пусть $\Gamma(N_0, k, 6)$, $N_0 \leq 2(q^2+q+1)$, $k \leq q+1$ – максимальный симметричный подграф графа инцидентности $\Gamma(2(q^2+q+1), q+1, 6)$ конечной проективной плоскости $\text{PG}(2,q)$. Если числами вершин, ребер и гексациклов графа $\Gamma(N_0, k, 6)$ являются $N_0 = 12\mu$, $N_1 = 6k\mu$, $N_2 = 2k\mu$, где $\mu = \chi/4(3-k)$, χ – эйлерова характеристика поверхности S в E^3 , то граф $\Gamma(N_0, k, 6)$ может быть представлен в форме правильной карты $\{6, k\}_r$ на S . В соответствии с четностью или нечетностью r поверхность S является ориентируемой (сфера с ручками) или неориентируемой (сфера со скрещенными колпаками). Символ $\{6, k\}_r$ означает, что карта составлена из гексагонов, в каждой вершине сходятся k из них. Сама карта получена из примитивной мозаики $\{6, k\}_r$ отождествлением тех пар ее вершин, которые разделены r шагами вдоль многоугольника Петри – “зигзага” из h ребер, в котором любые две, но не три последовательные стороны принадлежат одной грани. В общем случае, всякую регулярную карту $\{p, q\}_r$ на поверхности S можно “развернуть” так, что последняя составит часть правильной мозаики: при $(p-2)(q-2) < 2$ – сферической, при $(p-2)(q-2) = 4$ – евклидовой, при $(p-2)(q-2) > 4$ – гиперболической. Вышеизложенное можно сформулировать в виде теоремы: граф инцидентности $\text{PG}(2,q)$ является регулярным бихроматическим гамильтоновым графом степени $q+1$ и обхвата 6, также имеющим наименьший возможный порядок. Графы инцидентности $\text{PG}(2,q)$ при $q = 2, 3$ (графы Леви самодуальных конфигураций 7_3 и 13_4) приведены на рис. 4.1 α , 1.25 δ [21, 24].

Граф называется симметричным, если группа его автоморфизмов транзитивна как на множестве вершин, так и на множестве ребер. Согласно [24], все простейшие симметричные графы, по–видимому, можно вложить в подходящие поверхности так, чтобы они составили правильные карты. В отличие от графа, в котором возможно пересечение ребер, карта – разбиение поверхности S на N_2 непересекающихся односвязных областей N_1 ребрами, которые не имеют общих внутренних точек и объединяют в пары некоторые из N_0 вершин.

Общим примером вышеизложенного может служить граф $\Gamma(2 \cdot 13, 4, 6)$ плоскости $\text{PG}(2,3)$ (рис.4.15 α), который нельзя отобразить в форме правильной карты; что, например, возможно для его подграфа $\Gamma(2 \cdot 9, 3, 6)$. Последний может быть представлен правильной

картой $\{6,3\}_{3,0}$. Граф инцидентности $\Gamma(2 \cdot 7, 3, 6)$ плоскости Галуа $PG(2,2)$ может быть представлен и как граф Хивуда [22] – карта $\{6,3\}_{2,1}$ на торе (рис. 4.2a, б). Автоморфизмы карты, образующие ее группу, сохраняют отношение инцидентности для любых двух вершин ребра; инцидентные одной из них соответствуют ребрам инцидентным другой в том же или противоположном циклическом порядке. Следовательно, группа автоморфизмов карты $\{6,k\}$ является подгруппой группы коллинеаций и корреляций плоскости $PG(2,q)$, например, группа автоморфизмов конфигурации 10_3 – подгруппа индекса $2 \cdot 26$ в группе коллинеаций и корреляций $PG(2,3)$ порядка $2 \cdot 5616$.

Две карты называются элементарно-подобными, если могут быть преобразованы друг в друга посредством конечного числа элементарных операций: одномерного подразделения (новая вершина разбивает ребро на 2) и обратной ей операции одномерного укрупнения; двумерного подразделения (новое ребро разбивает грань на 2) и обратной операции двумерного укрупнения. Элементарными операциями во всякой карте могут быть выделены ручки, например, в регулярной карте на торе может быть выделена ручка, представимая в виде изогнутой p -угольной призмы, дополняющей сферу до тора. Удаление указанной ручки (p ребер в регулярной карте на торе) приводит к образованию на оставшейся сфере нерегулярной карты. Если регулярные разбиения сферы – тела Платона, то примером нерегулярных являются “сферические тела Каталани”, дуальные телам Архимеда. Например, в кубооктаэдре (теле Архимеда) грани двух типов, но в каждой вершине их схождение одинаково; в ромбододекаэдре (тело Каталани) все грани ромбы, но в вершинах они сходятся по 3 и по 4.

4.8. Конечные проективные плоскости $PG(2,3)$ и $PG(2,4)$. Кластеры алмазоподобных структур, содержащие икосаэдры в координационных сферах

Аналогично выделению в $PG(2,3)$ особой подконфигурации $\{13_4\}^{15}$, которая определяет 26–вершинный кластер АС (рис. 4.15в), в ТИ $PG(2,4)$ можно, отбросив 49 знаков инцидентности, выделить подконфигурацию, определяющую 40–вершинный кластер АС, содержащий 2 икосаэдра (из белых и черных точек) с центрами в 1 и $6'$ (рис. 4.21а). Дополнение этого кластера еще 3 белыми и 3 черными точками (I, II, III, и I', II', III') приводит к возникновению 46–вершинного объединения 4 икосаэдров (с центрами в $4'$, 1, $6'$, 14) на общей тройной оси.

Расположение на указанной оси атомов $5'$ и 18 (связям которых с атомами 5, 9, 13 и $9'$, $18'$, $21'$ не соответствуют знаки инцидентности ТИ $PG(2,4)$) позволяет получить 48-атомный кластер АС (рис. 4.21а), который определяется подконфигурацией уникального

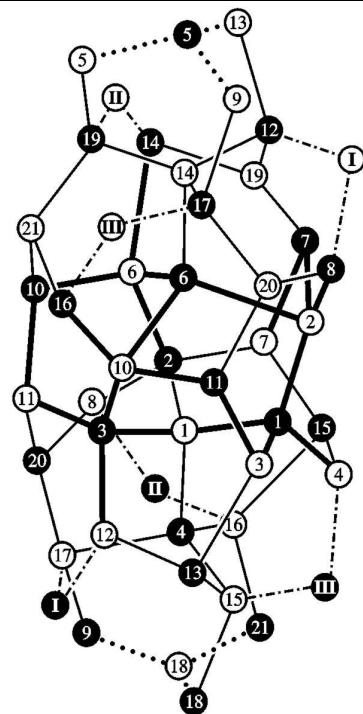
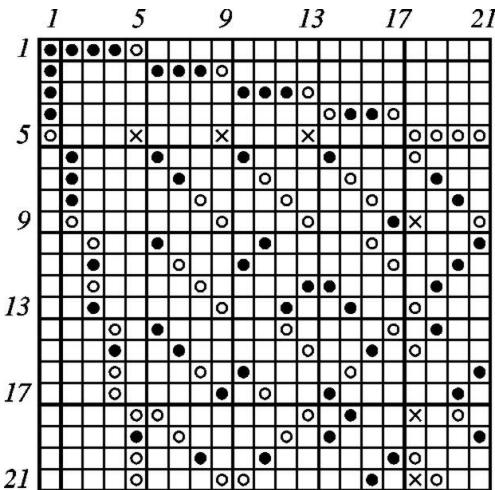
комбинаторного объекта MOG (чудесного генератора октад) [16]. MOG обобщает PG(2,4) и определяется таблицей 6×4 (рис. 4.21б) “римским точкам” I,II,III которой соответствуют точки I,II,III, а точке $\infty -18$ (рис. 4.21а,б).

В указанном случае, ТИ PG(2,4), в которой отброшено 52 знака инцидентности, определяет и 40-вершинный кластер АС, содержащий 2 икосаэдра (с центрами в 1 и 4') из белых и черных точек (рис. 4.21б). Дополнение кластера еще 6 черными точками (1'-6'), которым не соответствуют строки ТИ PG(2,4), и белым атомом 18, связям которого с вершинами 9', 18', 21' не соответствуют знаки инцидентности ТИ PG(2,4), позволяет получить 47-вершинный кластер АС (рис. 4.21б). Белые точки указанного кластера образуют центрированный куб с вписанным идеальным икосаэдром, деформация которого приводит к элементарной ячейке (ЭЯ) фазы Франка–Каспера A15 с федоровской группой $Pm\bar{3}n$. Черные точки образуют 26-вершинное объединение 4-х икосаэдров (с центрами в 1',2',3',4'), которые соответствуют фазе Франка–Каспера $TiNi_2$ с федоровской группой $Fd\bar{3}m$. Указанный 47-вершинный кластер, определяемый подконфигурацией PG(2,4), изоморfen ЭЯ гипотетической АС с федоровской группой $P4\bar{3}n = Pm\bar{3}n \cap Fd\bar{3}m$ [259].

Подконфигурация PG(2,4), определяющая наиболее симметричный кластер АС (рис. 4.21б), является максимальной по числу (56) содержащихся в ней знаков инцидентности PG(2,4). Минимальной особой подконфигурацией PG(2,4) можно считать расширенную конфигурацию Дезарга 10_3^3 , ТИ которой содержит на 3 знака инцидентности больше, чем ТИ конфигурации Дезарга 10_3 и вкладывается только в ТИ PG(2,4) [21].

Определяемый 10_3^3 кластер АС (20 вершин и 24 ребра) содержится в кластерах АС, определяемых подконфигурациями PG(2,4) (рис. 4.21б), которые можно рассматривать как различные варианты его усложнения. Сопоставление с полученными ранее результатами позволяет сделать вывод, что особые подконфигурации PG(2,q), $q = 2,3,4$ определяют особые кластеры АС по единому алгоритму.

Вследствие невозможности разбиения E^3 на идеальные икосаэдры, кластеры с икосаэдрическим упорядочением могут достигать лишь сравнительно небольших размеров. Таким образом, изоморфизм определяемого PG(2,4) кластера (рис. 4.21б) с ЭЯ кристаллической АС, осуществляющей разбиение E^3 на кубы, означает, что такой кластер является “предельно–допустимым”, а, следовательно, определяемые PG(2,q), $q \geq 5$ особые кластеры АС нереализуемы или являются объединением кластеров, определяемых PG(2,q), $q \leq 4$.

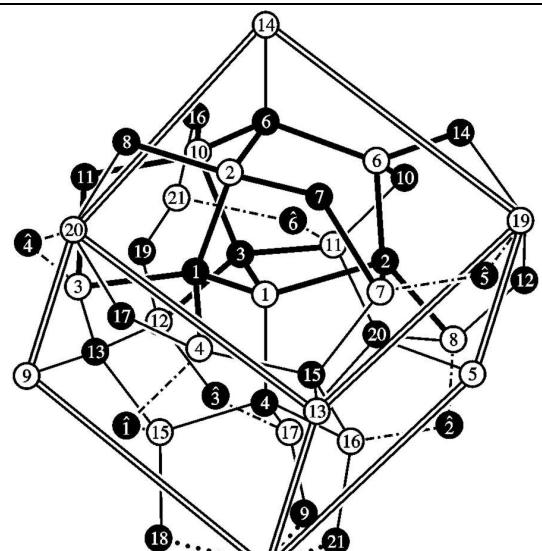
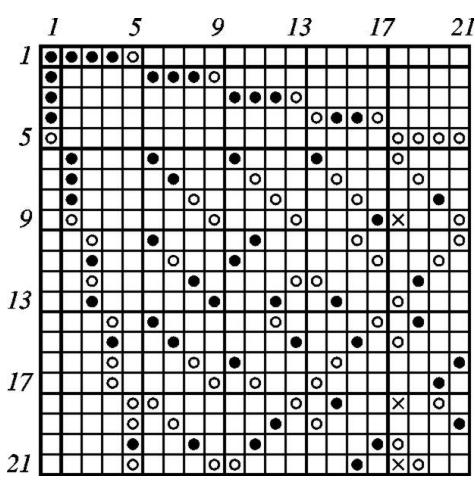


a

+	0	1	ω	$\bar{\omega}$	\times	0	1	ω	$\bar{\omega}$
0	0	1	ω	$\bar{\omega}$	0	0	0	0	0
1	1	0	ω	$\bar{\omega}$	1	0	1	ω	$\bar{\omega}$
ω	ω	$\bar{\omega}$	0	1	ω	0	ω	$\bar{\omega}$	1
$\bar{\omega}$	$\bar{\omega}$	1	0		$\bar{\omega}$	0	$\bar{\omega}$	1	ω

	0	1	ω	$\bar{\omega}$
∞	0			0
I	1			1
II	ω			ω
III	$\bar{\omega}$			$\bar{\omega}$

b



b

Рис.4.21. Таблица инцидентности PG(2,4), ее расширение до MOG (чудесного генератора октад) [16] и определяемые ими особые кластеры АС.

(*a*) Без показанных пустыми кружками 49 знаков инцидентности ТИ PG(2,4) определяет 40–вершинный кластер АС, который совместно с вершинами I, II, III и I', II', III', соответствующими римским точкам MOG, является объединением 4-х икосаэдров с центрами в 14, 6', 1, 4'. Вершинам 18 и 5' соответствует точка ∞ в MOG.

(*b*) Таблицы сложения (+) и умножения (\times) поля Галуа GF(4) = {0, 1, ω , $\overline{\omega}$ }, $\omega = \frac{1}{2}(i\sqrt{3} - 1)$ и MOG, как расширение PG(2,4).

(*c*) Без показанных пустыми кружками 52 знаков инцидентности ТИ PG(2,4) определяет 40–вершинный кластер АС; 20 белых вершин этого кластера совместно с вершиной 18 изоморфны ЭЯ фазы Франка–Каспера A15 – в показанный двойными линиями куб вписан икосаэдр с центром в 1. Совместно с 6 черными вершинами $\hat{1} - \hat{6}$, не принадлежащими ТИ PG(2,4), его 20 черных вершин образуют тетраэдр из икосаэдров (с центрами в 1', 2', 3', 4') или 26–вершинник из фазы Франка–Каспера TiNi₂ [8]. В целом, 47–вершинный кластер АС совпадает с ЭЯ гипотетической АС. Точечным пунктиром показаны связи, которым не соответствуют ребра графа инцидентности PG(2,4); в ТИ они показаны крестиками. Штрих–пунктиром показаны ребра, между принадлежащими и не принадлежащими графу инцидентности PG(2,4) вершинами. 20–вершинный кластер АС, определяемый расширенной конфигурацией Дезарга 10_3^3 , показан жирными линиями.

4.9. Несамодуальные и недезарговы конфигурации

и определяемые ими порождающие кластеры

алмазоподобных структур с сильно искаженными тетраэдрическими углами

В самодуальной конфигурации $(9_3)_3$ может быть выделена несамодуальная подконфигурация $((6 \cup 3)_3, (8 \cup 1)_3)_3$ с ТИ 8×6 , которая представляет собой пересечение $(9_3)_3$ с несамодуальной конфигурацией $(6_4, 8_3)$ (рис. 4.22*a,b*). Конфигурацию $(6_4, 8_3)$ можно рассматривать как множество восьми вершин и шести граней куба; каждая вершина принадлежит трем граням, а каждая плоскость содержит четыре вершины. Заменив каждую грань белой точкой, получим бихроматический граф ромбододекаэдра; так как грани образуют четырехугольник, $(6_4, 8_3)$ – негеометрическая конфигурация. Пересечение $(9_3)_3 \cap (6_4, 8_3)$ есть максимальная геометрическая подконфигурация конфигурации $(6_4, 8_3)$ (рис. 4.22*b*), при этом ТИ $(6_4, 8_3)$ содержит меньше знаков инцидентности, чем ТИ $(9_3)_3$, следовательно, подконфигурация $(9_3)_3 \cap (6_4, 8_3)$, определяющая 14-вершинный кластер с 6 гексациклами, вкладывается в несамодуальную конфигурацию $(6_4, 8_3)$. Граф указанного ПК получается из графа ромбододекаэдра при отбрасывании показанных пунктиром ребер, которым соответствуют пустые кружки в ТИ $(6_4, 8_3)$ (рис. 4.22*b,c*) и представляет собой граф

кластера, генерирующего структуру ВС–8 – объемно-центрированной фазы высокого давления Si.

Данная структура определяется искаженными (\approx до 100°) тетраэдрическими углами. ВС–8 можно считать “пограничной” структурой, находящейся между АС и тетраэдрическими (металлическими) структурами; в [260] структура ВС–8 была получена как аппроксимант икосаэдрического квазикристалла. Несамодуальный кластер LD^d (рис. 4.23a) определяется подконфигурацией $(8_3, 1_3+2_2+1_3+1_2+2_3+3_2)$ конфигурации $(10_3)_2$ и представляет собой объединение Z8 и Z10' (рис. 4.23б) [86].

Все рассмотренные ранее кластеры определялись дезарговыми подконфигурациями плоскостей PG(2,q), q = 2,3,4; но у плоскостей могут быть и недезарговы подконфигурации. Например, ступени Холла T₂ и T₃ (рис. 4.24) представляют собой конечные недезарговы проективные плоскости [21], вкладывающиеся, соответственно, в PG(2,2) и PG(2,3).

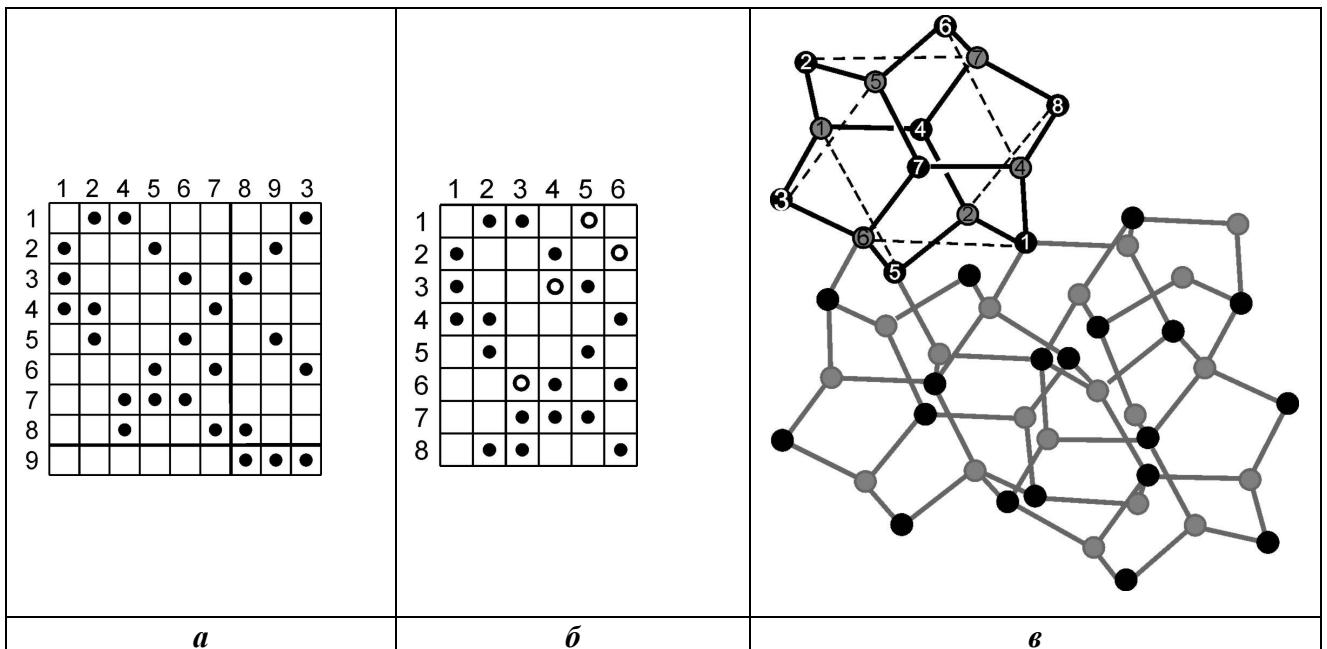


Рис.4.22. Структура кристалла ВС–8, генерируемая 14-вершинным кластером, который определяется пересечением конфигураций $(9_3)_3$ и $(6_4,8_3)$.

(а) Размещение за 9-м столбцом 3-го столбца “правой” ТИ $(9_3)_3$ приводит к ТИ; подтаблица 8x6 которой, выделенная жирными линиями, определяет кластер, генерирующий ВС–8.

(б) ТИ негеометрической конфигурации $(6_4,8_3)$ без пустых кружков определяет кластер, генерирующий ВС–8.

(в) Структура ВС–8, в которой выделен жирными линиями генерирующий ее кластер. С показанными пунктиром ребрами, которым в ТИ $(6_4,8_3)$ соответствуют пустые кружки, график этого кластера совпадает с графиком ромбододекаэдра.

Вследствие недезарговости T₂ (T₃), выражаемой непересечением между собой части

столбцов (строк) в ТИ T_2 (T_3), в бихроматическом графе инцидентности T_2 (T_3) возникнут отсутствующие в графе $PG(2,q)$ циклы, которые могут быть разделены на меньшие при соединении ребрами вершин одного цвета. Последнее означает, что в расширенной «инцидентностями» между точками или между прямыми дезарговой плоскости T_2 (T_3) можно выделить подконфигурацию, определяющую разбиение сферы на пента-, гекса- и гептацикли.

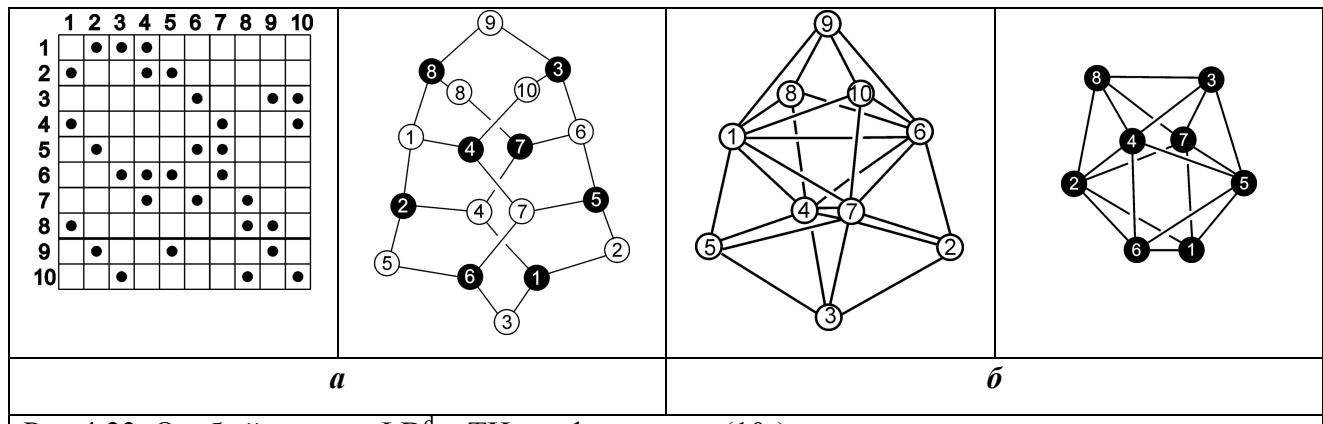


Рис.4.23. Особый кластер LD^d и ТИ конфигурации $(10_3)_2$.

(а) ТИ конфигурации $(10_3)_2$, подтаблица 8×10 которой полностью определяет LD^d .

(б) Белые вершины LD^d образуют 10-ти вершинное объединение 9-ти тетраэдров, черные вершины – полиэдр Бернала Z8.

Помимо T_2 плоскость $PG(2,2)$ содержит и подробно рассмотренную ранее подконфигурацию $7_3 \cap 10_3$, определяющую, как было показано выше, параллелоэдр алмаза. Пересечению $(7_3 \cap 10_3)$ с T_2 будет соответствовать отбрасывание еще двух знаков в ТИ T_2 . Если в ТИ отбросить еще один знак, а затем посредством стрелок установить “инцидентность” между точками 2–4 и 6–7, то полученная ТИ будет определять подконфигурацию $\{7_3 \cap 10_3 \cap T_2\}^{1-2}$. В символе подконфигурации верхний индекс 1 означает одно отбрасываемое “бихроматическое” ребро, а -2 означает введение двух добавочных ребер, не принадлежащих графу инцидентности подконфигурации $7_3 \cap 10_3 \cap T_2$ и соединяющих вершины одного цвета. Данная подконфигурация определяет граф 13-вершинного кластера с 2 “поперечными” пентациклами и 4 “боковыми” гексациклами (рис. 4.24б) $PG(2,3)$ содержит ступень Холла T_3 и конфигурацию 8_3 , поэтому граф инцидентности подконфигурации $\{8_3 \cap (9_3)_2 \cap T_3\}^{-2}$ определяет граф 15-вершинного кластера с 2 “поперечными” гептациклами и 4 “боковыми” гексациклами (рис. 4.24б).

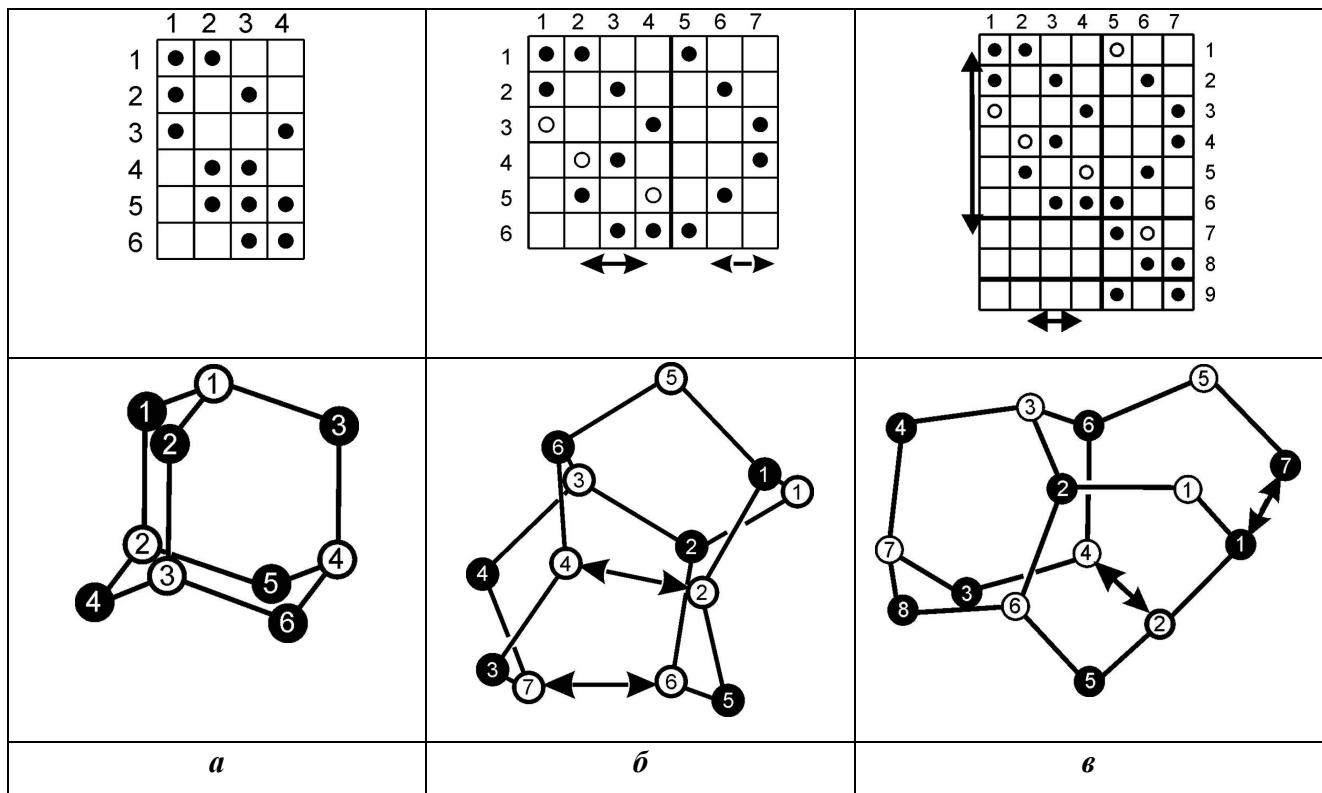


Рис.4.24. Конечные недезарговы плоскости [21] и определяемые подтаблицами их таблиц инцидентности порождающие кластеры с пента-, гекса- и гептациклами.

(*a*) ТИ конфигурации $(4_3, 6_2)$ – собственного четырехугольника и определяемый ею ПК адамантана.

(*b*, *c*) Расширенные (посредством стрелок) ТИ конечных недезарговых плоскостей и определяемые их подтаблицами 6×7 и 8×7 кластеры с пента-, гекса- и гептациклами. Приведенная на (*a*), (*b*), (*c*) последовательность ТИ (без стрелок) – это последовательность ступеней T_1, T_2, T_3 модели Холла, возникающая при попеременном добавлении столбцов и строк к предыдущей ступени. Подтаблица предыдущей ступени выделена жирной линией в последующей. Пента- и гептацикли выделены жирными линиями. Связи между вершинами одного цвета показаны стрелками.

4.10. Система порождающих кластеров алмазоподобных структур

Построение системы ПКТ позволяет определять ПК символом, аналогичным символу составного полиэдра:

$$PK_{i,j} = ((m_1+m_2)_f, (n_1+n_2)_d)^{\lambda-\rho} < i,j >, \quad (4.16)$$

где: $((m_1+m_2)_f, (n_1+n_2)_d)$ - минимальная подконфигурация (m_f, n_d) , $m, n = 4, \dots, 10$ конечной проективной плоскости $PG(2, q)$, $q = 2, 3, 4$ таблица инцидентности которой содержит подтаблицу $m_f \times n_f$, определяющую бихроматический граф ПК при отбрасывании из нее λ , знаков инцидентности: i, j – номера ПК из системы ПКТ. Добавка ρ ребер, соединяющих

вершины одного цвета (и не принадлежащих графу инцидентности $PG(2,q)$) в бихроматическом графе ПКТ, приводит к графу ПК, который содержит и пента (гепта)-циклы. В дальнейшем для простоты мы будем пользоваться лишь упрощенным символом $(m_f, n_d)^\lambda <i,j>$, в котором $(m_f, n_d)^\lambda$ минимальная подконфигурация, в которую вкладывается граф ПК. Подконфигурация $PG(2,q)$ может определяться и пересечением конфигураций. Если ПК определяется конгруэнтными ПКТ, последний (будучи “самодуальным”) обозначается символом $\text{ПК}_{i,i}$ $(m_f)^\lambda <i>$. К таким ПК относятся, в частности, рассмотренные ранее параллелоэдры алмаза – $\text{ПК}_{24,24} = (7_3 \cap 10_3) <24>$ (рис. 4.26) и ПК ячейки политопа $\{240\}$ $\text{ПК}_{16,16} = (7_3)^3 <16>$ (рис. 4.20г). Примером ПК “общего вида” является несамодуальный ПК ВС–8, (рис. 4.22б) определяемый символом $\text{ПК}_{23,28} = (6_4, 8_3) <23,28>$.

Символ ПК (4.16) позволяет определить систему ПК как квадрат Кэли (таблицы 3.1), в которой все ПКТ расположены в строку и столбец, а ПК определяется как “произведение” ПКT_i из i -ой строки и ПКT_j из j -го столбца. $\text{ПК}_{i,j}$ и $\text{ПК}_{j,i}$ – энантиаморфны [6, 177], поэтому, в табл. 4.1, представляющей часть системы ПК, помещен лишь символ $\text{ПК}_{i,j}$, а на место (симметрично расположенного относительно диагонали) $\text{ПК}_{j,i}$ помещается символ конфигурации (m_f, n_d) . Для самодуальных ПК $_{i,i}$, расположенных на диагонали, такая информация размещается на пересечении i -го столбца с подтабличной строкой, при этом число вершин $\text{ПК}_{i,j}$ равно сумме вершин ПКT_i и ПКT_j .

Порядок размещения ПКТ в строке и столбце табл. 4.1 выбран так, чтобы блочное строение системы ПК отражало закономерности строения алмазоподобных структур, в частности, их деление на 3 основных типа: “политопный”, “реально-кристаллический” и промежуточный (“линейно – дефектный”). Блоки выделены жирными линиями.

В “реально-кристаллическом” блоке размещены ПК, из которых могут быть собраны подструктуры кристаллических АС с введенными в них линейными дефектами. L_1 – 8-вершинный “фонарь” из структуры лонсдейлита, возникающим при движении двух тетраэдров в составном полиэдре $\{4,3\}[2\{3,3\}]\{3,4\}$ вдоль общей тройной оси. L_2 генерирует канал 0001 в лонсдейлите. Кластеры лонсдейлита $L_1 = \text{ПК}_{21,21} = \{4,3\} <21>$ и $L_2 = \text{ПК}_{23,23} = \{3,5\} <23>$ возникают при отбрасывании вершин 2, 3, 4, 1', 2', 7' и 1, 4 в кластере лонсдейлита $L_3 = \text{ПК}_{24,24} = (9_3) <24>$ (рис. 4.4а). При отбрасывании в параллелоэдре алмаза $D_2 = \text{ПК}_{24,24} = (7_3 \cap 10_3) <24>$ (рис. 4.26), 4 вершин возникает кластер $D_1 = \text{ПК}_{21,23} = (4_3, 6_2) <21,23>$, совпадающий с углеродным остовом молекулы адамантана (рис. 4.24а). ПК ядра винтовой дислокации в алмазе $\text{ПК}_{25,25} = (9_3)_3 <25>$ (рис. 4.4в) обозначен в табл. 4.1 через D_2^d . Самодуальные ПК из полиэдров Бернала $\text{ПК}_{26,26} = 2Z8 = (9_3)_2 <26>$ (рис. 4.3б) и $\text{ПК}_{29,29} = 2Z9 = (9_3)_1 <29>$ могут генерировать линейные дефекты в АС.

Таблица 4.1. Часть системы ПК, представленная в форме “таблицы умножения” полиэдров из таблицы 3.1.

	1	2	3	14	16	17	18	19	21	22	23	24	25	26	28	29	37	
1	Dod		Dod															
2															LD ^d			
3	10_3^3																	
14												R8						
16					{240}								$\frac{30}{11}^{-dc}$					
17							$\frac{40}{9}$					al-Ge						
18					$\tilde{10}_3^4$	$\frac{30}{11}$						D_2^R, L_3^R						
19							$\frac{30}{11}-2$					D_2^{dk}						
21									PB L_1			D_1						
22										M_2^2								
23			$(6_4, 8_3)^{-1}$					$4_3, 6_2$			L_2			BC8				
24				T_3^2	T_3^3	7_3	$(9_3)_2$	T_2^2				D_2, L_3						
25												D^d						
26			$(10_3)_2$									$2Z_8$						
28										$6_4, 8_3$								
29														$2Z_9$				
37															Dod			
	$\tilde{10}_3^4$				7_3	7_3	$\{3,5\}$	4_3	$\{4,4\}_{3,1}$	$\{3,5\}$	$\frac{7_3}{(9_3)_2}$	$(9_3)_3$	$(9_3)_2$	$(9_3)_1$	10_3			

В политопном блоке размещены кластеры политопа {240}, минимальным из которых является 8-вершинный Р.В. (petit barelan [6]), задаваемый символом $\text{ПК}_{21,21} = (4_3) <18>$, где 4_3 – самодуальная конфигурация из вершин и граней тетраэдра. Р.В. возникает из L_1 при вращении одного из тетраэдров вокруг общей оси; направление вращения определяется энантиоморфизмом {240}. $\text{ПК}_{30/11} = \text{ПК}_{18,18} = (7_3^3) <18>$ (рис. 4.20 σ), генерирующий канал в политопе {240} самодуален, а $\text{ПК}_{40/9} = \text{ПК}_{17,18} = (10_3^4, 10_3^4) <17,18>$ (рис. 4.19 δ) хотя и вкладывается в самодуальную конфигурацию 10_3^4 , образован двумя неконгруэнтными ПКТ.

В промежуточный блок попадают и «энантиаморфные копии» неэнантиаморфных ПК, например $\text{ПК}_{18,24} = D_2^R = (7_3 \cap 10_3) <18,24>$ представляет собой просто закрученный

вправо ПК_{24,24} (рис. 4.2б). Действительно, ядро винтовой дислокации в алмазе энантиаморфно, поэтому граничащие с ним ПК алмаза тоже должны быть энантиаморфны. Кластеры ПК алмаза, которые граничат с ними, обладают уже меньшим энантиаморфизмом и вплоть до полного отсутствия энантиаморфизма в достаточно удаленных от ядра винтовой дислокации ПК алмаза. ПК с пента(гепта)циклами также попадают в промежуточный блок. Если в ПК ВС–8 = (6₄8₃)<23,28> черные вершины 7 и 4 ПКТ №28 (табл.3.1) соединить внутренним ребром, то возникает ПК R8 = (6₄,8₃)⁻¹<14,23>, также как и ПК ВС–8, генерирующий кристаллическую фазу высокого давления в Si. Следовательно, можно считать, что возникновение пентациклов в ПК с четным количеством вершин обусловлено наличием внутреннего ребра.

Введение $+2\pi/6$ ($-2\pi/6$) дисклинаций в ПК D_2 (ПК 30/11) приводит к их трансформации в ПК D_2^{+dc} (ПК 30/11^{dc}) с поперечными пента(гепта)циклами. Данные ПК определяются недезарговыми конфигурациями T_2 и T_3 ступеней Холла (рис. 4.24б,в), и сокращенно обозначаются следующим образом: ПК $D_2^{+dc} = \text{ПК}_{19,24} = T_2^2 <19,24>$, и ПК $30/11^{-dc} = \text{ПК}_{16,24} = T_3^2 <16,24>$. Таким образом, введение дисклинаций (вдоль особых направлений) в ПК с четным числом вершин трансформирует их в ПК с нечетным числом вершин, содержащие пента(гепта)циклы перпендикулярные осям дисклинаций.

Кристаллический и политопный блоки завершают 20-вершинные ПК, которые могут быть трансформированы в додекаэдры [33]. Додекаэдр является минимальным идеальным ПК тетракоординированной, но не алмазоподобной структуры. Поэтому завершение табл.4.1 кластерами ПК₁₁ и ПК_{37,37} означает выделение АС из всего класса тетракоординированных структур: клатратов, газогидратов и других, что позволяет определить (идеальную) АС, как тетракоординированную структуру, собираемую из кластеров табл.4.1.

4.11. Заключение

По результатам настоящей главы можно сделать следующие выводы:

1. Система ПКТ позволяет определить порождающий кластер идеальной алмазоподобной структуры (ПК) как невыпуклый полиэдр, вершины которого принадлежат двум ПКТ из системы ПКТ. Граф такого ПК, образованный объединением ближайших друг к другу вершин, составляющих его ПКТ, вкладывается в граф инцидентности конструкции комбинаторной геометрии – в частности, конечной проективной геометрии PG(2,q), q = 2, 3, 4. Система ПК строится как квадрат Кэли для всех ПКТ из системы ПКТ, каждый ПК определяется объединением ПКТ строки и столбца.

2. При образовании графа ПК объединением ближайших друг к другу вершин разных (условно, “белого” и “черного”) ПКТ может возникнуть N-вершинный, $8 \leq N \leq 20$, бихроматический граф. Этот граф вкладывается в граф политопа {240} – алмазоподобного объединения двух (условно “белого” и “черного”) политопов {3,3,5}, которое может быть построено из политопа {3,4,3} по замкнутому алгоритму Госсета. Расслоение Хопфа для политопа {240} может быть реализовано в двух вариантах, которым соответствуют графы ПК, не имеющие либо циклов, либо “висячих” вершин. Это ПК углеводородно-подобной структуры (ПКУ) и ПК алмазоподобной структуры (ПКА).

3. Объединения двух 7-вершинных линейных тетраблоков приводят к 14-вершинным ПКА и ПКУ, бихроматические графы которых определяются конфигурациями конечной проективной геометрии 7_3 и 7_4 , соответственно. Объединение двух ПКА по общему гексациклу (в конформации “твист-ванна”) генерирует канал в политоп {240}, а объединение двух ПКУ по общей вершине генерирует спираль в политопе {240}. Симметрийно – допустимым преобразованием (не изменяющим числа вершин, ребер и циклов) 14-вершинный ПКА трансформируется в невыпуклый параллелоэдр алмаза, “гранями” которого являются гексацикли в конформации “кресло”.

4. Если в ПК ближайшими друг к другу являются и вершины одного ПКТ, то граф такого ПК' (который не может быть вложен в политоп {240}) может содержать пента-, гекса-, гептацикли и “висячие” вершины. Графы N-вершинных ПКА и ПКУ при $N = 2n$ определяются n-вершинными (под)конфигурациями конечной проективной геометрии, при $N \neq 2n$ – пересечениями таких (под)конфигураций. Выделение алмазоподобных и углеводородно-подобных структур из всего класса тетракоординированных структур (включающего клатраты, фуллериты и т.п.) определяется ограничением ПКА лишь 20-вершинными ПК, т.к. такие ПКА уже могут быть трансформированы в додекаэдр симметрийно-допустимыми преобразованиями.

5. Симметрии политопа {240} позволяют выделить среди ПКУ составной (ПКУс) и декорирующий (ПКУд) тетраблоки, определяемые объединением 7-вершинного линейного тетраблока с его конгруэнтной копией и тетраэдром, соответственно. Если для двух ПКА объединение возможно лишь по общему циклу, то для двух ПКУ объединение возможно либо по общей вершине, либо по общему ребру одного из двух ПКТ, образующих ПКУ. Выбор законов объединения определенного числа ПКУс или ПКУд позволяет априори определять симметрийно-возможные структуры углеводородных цепей – типичных компонентов молекул фосфолипидов биомембран.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [33, 35-37, 42-44, 48, 57, 66, 70, 90, 98, 116-118, 131-136].

Глава 5. Алмазоподобные структуры как результат закономерной сборки спиралей, генерируемых порождающими кластерами с пента-, гекса- и гептациклами

5.1. Введение

Управляемый синтез детерминированных некристаллических твердотельных структур невозможен без определения закона их строения. Классическая кристаллография ограничена принципом трансляционной инвариантности и трехмерным евклидовым пространством E^3 , поэтому адекватное описание таких структур возможно лишь в рамках локального подхода в n -мерном, $n \geq 3$ (не обязательно евклидовом) пространстве. Теорема локальности [137] позволяет утверждать, что в любой правильной системе точек можно выделить минимальный конечный кластер, однозначно определяющий ее; т.о., дальний порядок является следствием ближнего. Для детерминированных некристаллических структур локальный подход означает наличие ограниченного набора (минимальных) порождающих кластеров (ПК), сборка которых обеспечивается локальными математическими правилами.

Локальный подход для некристаллических тетраэдрических (силикаты, сплавы) и тетракоординированных (цеолито – и алмазоподобных) структур конкретизируется посредством теории политопов [5, 6, 9, 24, 177]. Политопный подход и другие [33] работы по созданию обобщенной кристаллографии алмазоподобных структур оставили нерешенными ряд проблем, принципиальной из которых оставалось построение базисного аналитического аппарата, способного отобразить установленные закономерности на “абстрактно-математическом” уровне. Данная глава посвящена построению этого аппарата и априорному выводу на его основе детерминированных алмазоподобных структур, которые реализуются в кристаллических фазах высокого давления, кристаллах с линейными дефектами, квазикристаллах, тонких пленках, наноматериалах [261-267]. Развиваемый подход позволяет объяснить и структурный механизм фазовых переходов в таких материалах.

5.2. Кристаллографические решетки и параллелоэдр структуры алмаза

Решетка D_3 эквивалентна ГЦК-решетке, поэтому дуальная к ней решетка D_3^* эквивалентна ОЦК-решетке и определяется как объединение четырех решеток D_3 (рис.5.1a):

$$D_3^* = \bigcup_0^3 [i] D_3, \quad D_3 = Fr_{00} = \{r_{0k} = t_k r_{00} | t_k \in F\}, \quad D_3^* = Ir_{00} = \{r_{0j} = \tau_j r_{00} | \tau_{00} \in I\}, \quad (5.1)$$

где $[o]D_3 = D_3$, r_{00} – стартовая точка решетки $[o]D_3$, $[i] = \{\frac{i}{4}, \frac{i}{4}, \frac{i}{4}\}$ - вектор склейки решетки D_3 ; $[i]D_3$ - решетка D_3 сдвинутая на $[i]$ по отношению к D_3 ; $F = \{(a+b)/2, (a+c)/2, (b+c)/2\}$ - подгруппа трансляций пространственной группы $Fm3m$, отображающей D_3 на себя, $I = \{(a+b-c)/4, (b+c-a)/4, (a-b+c)/4\}$ подгруппа трансляций группы $Im3m$, отображающей D_3^* на себя [16].

Пусть $V_{i0} = [i]V_{00}$ – полиэдр Дирихле стартового узла $r_{i0} = [i]r_{00}$ решетки $[i]D_3$. По определению, V_{00} является параллелоэдром [154], поэтому, согласно [16, 268]:

$$D_3^* = D_3 \cup FV_{00}, \quad \bigcup_1^3 [i]D_3 \supset V_{00} \not\subset D_3, \quad (5.2)$$

где $F \cdot V_{00} = \{V_{0k} = t_k V_{00} | t_k \in F\}$; V_{00} - ромбододекаэдр, вершины которого образуют: тетраэдр "носиком вверх", октаэдр и тетраэдр "носиком вниз", принадлежащие решеткам $[i]D_3$, $i=1,2,3$ соответственно (рис.5.1b). В символике Шлефли [24] V_{00} может быть представлен в виде:

$$V_{00} = {}_1\{3,3\}_{00} \cup {}_2\{3,4\}_{00} \cup {}_3\{3,3\}_{00}, \quad (5.3)$$

где $\{3,3\}$, $\{3,4\}$ - символы Шлефли тетраэдра и октаэдра, левый индекс i указывает на принадлежность полиэдра решетке $[i]D_3$, правый определяет центр полиэдра в узле r_{00} решетки D_3 .

В объединении полиэдров Дирихле стартовых точек решеток $[i]D_3$ $i=1,2,3$, обязательно содержится хотя бы одна точка из D_3 , поэтому

$$D_3^* = F(\bigcup_1^3 V_{i0}) \supset D_3. \quad (5.4)$$

В силу соотношений (5.1) – (5.4),

$$D_3^* \cap D_3 = F\left(\bigcup_1^3 V_{i0}\right) \cap D_3 = F\left(\bigcup_1^3 ([i]V_{00} \cap D_3)\right) = D_3, \quad (5.5)$$

где $V_{10} \cap D_3 = {}_0\{3,3\}_{10}$, $V_{20} \cap D_3 = {}_0\{3,4\}_{20}$, $V_{30} \cap D_3 = {}_0\{3,3\}_{30}$ - выпуклые части ромбододекаэдров $[i]V_{00}$. Центры $r_{i0} = [i]r_{00}$ этих полиэдров являются стартовыми точками решеток $[i]D_3$, $i=1,2,3$, поэтому

$$\bigcup_1^3 ([i]V_{00} \cap D_3) = {}_0\{3,3\}_{10} \cup {}_0\{3,4\}_{20} \cup {}_0\{3,3\}_{30} = {}_0P_{20}(D_3), \quad (5.6)$$

представляет собой параллелоэдр с центром в r_{20} (рис.5.1d) - примитивный ромбоэдр ГЦК-решетки [154]. Действительно, каждая решетка определяет параллелоэдрическое разбиение трехмерного евклидова пространства E^3 либо на полиэдры Дирихле, либо на примитивные параллелепипеды; следовательно, между этими параллелоэдрами должно существовать соотношение связи. Таким соотношением является (5.6), устанавливающее связь между параллелоэдром Дирихле V_{00} и примитивным ромбоэдром ${}_0P_{20}(D_3)$. Равенство объемов этих параллелоидов, определяется возможностью трактовки ромбододекаэдра как октаэдра ${}_0\{3,4\}$, на каждую из 8 граней которого поставлена $1/4$ тетраэдра ${}_0\{3,3\}$. Иными словами, от определяемого ГЦК-решеткой разбиения E^3 на тетраэдры и октаэдры можно перейти к разбиению на ромбоэдры (5.6), а от него к разбиению на ромбододекаэдры: ${}_0\{3,3\} \cup {}_0\{3,4\} \cup {}_0\{3,3\} = 8(1/4 \cdot {}_0\{3,3\}) \cup {}_0\{3,4\} = V_{00}$.

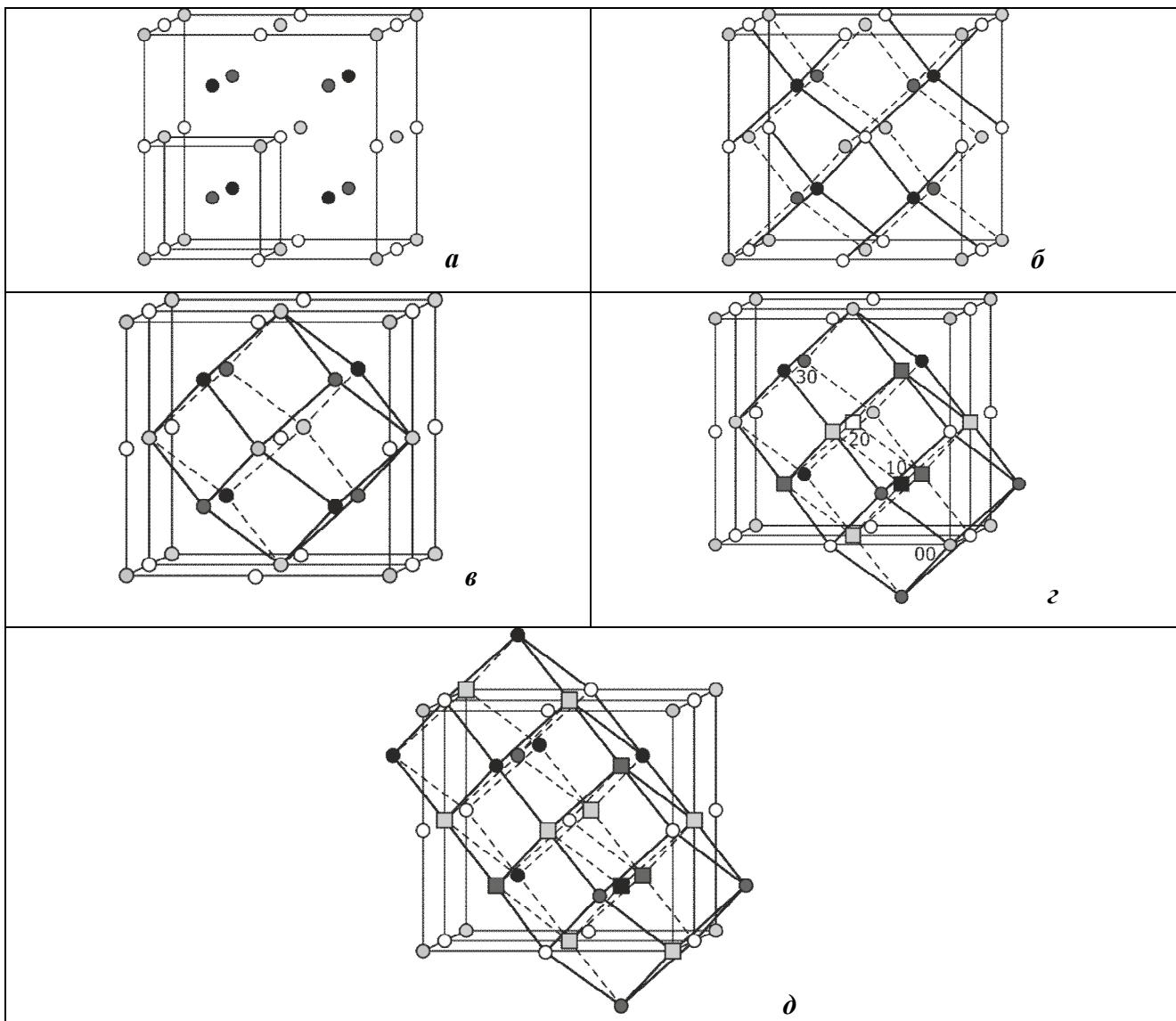


Рис.5.1. Подструктуры ОЦК-решетки D_3^* двойственной к ГЦК-решетке D_3 .

- (а) D_3^* как объединение четырех ГЦК-решеток D_3 , $[1]D_3$, $[2]D_3$ и $[3]D_3$, показанных белыми, черными, заштрихованными и клетчатыми шарами.
- (б) D_3^* как объединение двух структур алмаза: D_3^+ (белые и черные шары) и $[2]D_3^+$ (заштрихованные и клетчатые шары).
- (в) Ромбододекаэдр – полиэдр Дирихле узла решетки D_3 (белого шара). Вершины ромбододекаэдра образуют: тетраэдр «носиком вверху» (черные шары), октаэдр (заштрихованные шары) и тетраэдр «носиком книзу» (клетчатые шары), принадлежащие решеткам $[1]D_3$, $[2]D_3$ и $[3]D_3$.
- (г) Полиэдры Дирихле (ромбододекаэдры) решеток $[2]D_3$, $[3]D_3$ с центрами в белом и черном узлах. Вершины примитивного (тупого) ромбоэдра ОЦК-решетки, который является пересечением этих центрированных ромбододекаэдров показаны квадратами. Для точек на диагонали куба приведены их обозначения. Пересечение этих же ромбододекаэдров со структурой алмаза (заштрихованные и клетчатые шары) является параллелоэдром алмаза $P_{2|3}(D_3^+)$, в котором вершины внутреннего кресла показаны квадратами.
- (д) Полиэдры Дирихле (ромбододекаэдры) решеток $[1]D_3$, $[2]D_3$ и $[3]D_3$ с центрами в черном, белом и клетчатом узлах. Пересечениями этих ромбододекаэдров с D_3 (заштрихованные шары) являются: тетраэдр «носиком книзу», октаэдр и тетраэдр «носиком вверху», образующие примитивный ромбоэдр решетки D_3 , вершины которого отмечены квадратами.

Самосклейка $D_3^+ = D_3 \cup [1]D_3$ решетки D_3 образует структуру алмаза, являющуюся лишь упаковкой, но не решеткой [16], поэтому D_3^* можно рассматривать как объединение двух структур алмаза (рис.5.1б):

$$D_3^* = D_3 \cup [1]D_3 \cup [2]D_3 \cup [3]D_3 = D_3^+ \cup [2]D_3^+. \quad (5.7)$$

В (5.7) множество $D_3^* = \bigcup_{i=0}^3 [i]D_3$ разбивается на два неконгруэнтных подмножества - D_3 и

$\bigcup_{i=1}^3 [i]D_3$, и на два конгруэнтных, каждое из которых является самосклейкой D_3 . И V_{20} , и V_{30}

осуществляют параллелоэдрическое разбиение $E^3: E^3 = F \cdot V_{20} = F \cdot V_{30}$, поэтому в случае (5.7):

$$\begin{array}{cccc} 3 & 3 & 3 & 3 \\ \widetilde{V}_{20} = \bigcup_{n=0} (\widetilde{V}_{20} \cap t_n \widetilde{V}_{30}) = \bigcup_{n=0} \widetilde{R}_{20,n} & \text{и} & \widetilde{V}_{30} = \bigcup_{n=0} (\widetilde{V}_{30} \cap \bar{t}_n \widetilde{V}_{20}) = \bigcup_{n=0} \widetilde{R}_{30,n}, & (5.8) \end{array}$$

где \widetilde{V}_{20} , \widetilde{V}_{30} - центрированные V_{20} , V_{30} , $t_0 = 0$, $\bar{t}_n = -t_n$, $t_n \in F$, $\widetilde{R}_{20,0} = \widetilde{R}_{30,0} = \widetilde{V}_{20} \cap \widetilde{V}_{30} = \widetilde{R}_{2|3}$

примитивный (тупой) ромбоэдр ОЦК-решетки D_3^* с центром в точке r_{23} (находящейся посередине отрезка r_{20} и r_{30}), который осуществляет параллелоэдрическое разбиение $E^3: E^3 = I \cdot \widetilde{R}_{2|3}$. Группа $\bar{3}m$ точечной симметрии $R_{2|3}$ та же, что и у объединения ромбододекаэдров $V_{20} \cup V_{30}$.

С учетом (5.7), (5.8) соотношения (5.4), (5.5) для D_3^+ примут вид:

$$D_3^* = D_3^+ \cup [1]D_3 = F \cup V_{i0} = F(\bigcup_{i=2} \bigcup_{n=0} \widetilde{R}_{i0,n}), \quad (5.4')$$

$$D_3^+ = D_3^* \cap D_3^+ = F(\bigcup_{i=2} (V_{i0} \cap D_3^+)) = F(\bigcup_{i=2} \bigcup_{n=0} (\widetilde{R}_{i0,n} \cap D_3^+)) = F(\bigcup_{i=2} \bigcup_{n=0} R_{i0,n}), \quad (5.5')$$

где $R_{i0,n} = \widetilde{R}_{i0,n} \cap D_3^+ = \bigcup_{n=0}^3 V_{i0} \cap (-1)^i t_n V_{(((-1)^i + i)0)}$. В силу (5.8), вершины $\widetilde{R}_{i0,n}$, лежащие на

тройной оси, принадлежат $[2]D_3^+$, поэтому $R_{i0,n}$ - это тригональная антипризма, 6 вершин которой образуют гексациклическое кресло (рис.5.1г). Соотношения (5.5') позволяют определить параллелоэдр структуры алмаза (рис.5.1г) аналогично (5.6):

$$P_{2|3}(D_3^+) = \bigcup_{i=2}^3 V_{00} \cap D_3^+ = \bigcup_{i=2}^3 R_{i0,n}, \quad (5.6')$$

как пересечение с D_3^+ объединения $V_{20} \cup V_{30}$, которое состоит из объединения шести попарно параллельных тригональных антипризм вокруг центральной и сохраняет ее группу точечной симметрии $\bar{3}m$.

Полиэдры, примыкающие друг к другу равными и параллельными (в отдельном полигоне и всей их совокупности) гранями, Е.С. Федоров назвал параллелоэдрами; при этом параллелоэдры с центром инверсии внутри были названы примитивными, а без него вторичными. Примитивный параллелоэдр является простым, если он обладает лишь одной парой равных и параллельных граней; простые параллелоэдры могут быть и невыпуклыми [269, С.320]. Невыпуклость (простого примитивного) параллелоэдра $P_{2|3}(D_3^+)$ удовлетворяет определению параллелоэдра и в силу асимметрии федоровской группы $Fd\bar{3}m$ алмаза, т.к. для асимметрических систем "... параллелоэдры здесь являются в значительной мере неопределенными" [269, С.328].

Структура алмаза D_3^+ - это самоклейка двух D_3 ; поэтому представляется удобным определить параллелоэдр алмаза $P_{2|3}(D_3^+)$ и как объединение двух особых кластеров решеток D_3 и $[1]D_3$. Действительно, в силу (5'):

$$\begin{aligned} P_{2|3}(D_3^+) &= (V_{20} \cup V_{30}) \cap D_3^+ = (V_{20} \cap D_3^+) \cup (V_{30} \cap D_3^+) = \\ &= ({}_0\{3,4\}_{20} \cup {}_1\{3,3\}_{20}) \cup ({}_0\{3,3\}_{30} \cup {}_1\{3,4\}_{30}) = \\ &= ({}_0\{3,4\}_{20} \cup {}_0\{3,3\}_{30}) \cup ({}_1\{3,3\}_{20} \cup {}_1\{3,4\}_{30}) = {}_0[3^1,4^3,5^3]_{2/3} \cup {}_1[3^1,4^3,5^3]_{2/3}, \end{aligned} \quad (5.6'')$$

где ${}_i\{3,4\}_{(i+2)0} \cap {}_i\{3,3\}_{(i+2)0} = {}_i\{3\}$, ${}_i\{3,4\}_{(i+2)0} \cup {}_i\{3,3\}_{(i+2)0} = {}_i[3^1,4^3,5^3]$, $i = 0,1$ - одношапочные октаэдры с общим центром в r_{23} ; символ в квадратных скобках означает, что в одношапочном октаэдре (тетраэдре, "поставленном" на октаэдр) в одной вершине сходятся три ребра, в трех - по четыре, и в трех - по пять. Одношапочные октаэдры ${}_i[3^1,4^3,5^3]$, $i = 0,1$ - конгруэнтны, следовательно, как и решетки $[i]D_3$, они совмещаются центром инверсии $\bar{1}_{23}$, расположенным в r_{23} . Таким образом,

$$P_{2|3}(D_3^+) = P_{2|3}(D_3 \cup [1]D_3) = [3^1,4^3,5^3] \cup \bar{1}_{23}[3^1,4^3,5^3] = [2^6,3^8]_{2|3}, \quad (5.9)$$

где $[3^1,4^3,5^3] \subset D_3$, $\bar{1}_{23}[3^1,4^3,5^3] \subset [1]D_3$.

В силу соотношений (5.9) $[3^1, 4^3, 5^3]$ должен быть особым кластером D_3 . Действительно, точки D_3 являются вершинами квазирегулярного разбиения E^3 на тетраэдры и октаэдры, которое обозначается $\{3,^3_4\}$ в символике Шлефли. Федоровской группой $\{3,^3_4\}$ является $Fm\bar{3}m$, которая является группой отражений (аффинной группой Вейля). Плоскости отражения определяют фундаментальную область группы, поэтому возникает возможность определения орбит этой группы (или ее подгруппы) посредством конструкции Виттхофа. Для этого вершины диаграммы, являющиеся вершинами подобласти фундаментальной области, отмечаются кружочками, а стартовая точка орбиты является внутренней точкой этой подобласти. Метрические свойства регулируются выбором стартовой точки [16, 24]. Так, например:

$$\begin{array}{ccc}
 \text{Diagram 1: } & = \{3\} & \\
 \text{Diagram 2: } & = \{3,4\} & \\
 \text{Diagram 3: } & = \{3,3\} & \\
 \text{Diagram 4: } & = \{3,^3_4\} &
 \end{array} \tag{5.10}$$

т.е. плоскости отражения, порождающие $Fm\bar{3}m$, являются плоскостями отражения тетраэдра $\{3,4\}$ и (или) октаэдра $\{3,3\}$, имеющих общую треугольную грань $\{3\}$, и, следовательно, образующих $[3^1, 4^3, 5^3]$. Иными словами, если плоскости отражения порождают точечные группы октаэдра и тетраэдра, образующих одношапочный октаэдр, то эти плоскости порождают и федоровскую группу $Fm\bar{3}m$, отображающую решетку D_3 на себя. В этом смысле одношапочный октаэдр $[3^1, 4^3, 5^3]$ можно назвать порождающим полиэдром решетки D_3 .

5.2.1. Структура алмаза и ее однозначное отображение в решетку декорированных ромбов

Мозаика $\{p,q\}$ может быть разбита на "зигзагообразные" орбиты плоскостей скользящего отражения – многоугольники Петри (м.П), любые две, но не три последовательные стороны которых принадлежат одной грани мозаики [22]. Карта $\{6,3\}_{2,1}$ (как часть $\{6,3\}$) также может быть разбита на непересекающиеся конгруэнтные м. П. Подробно рассмотренный переход к графу $\{6,3\}_{2,1}^3$ обуславливает выделение лишь одного гексацикла 10-7-9-6-8-5-10, в котором все вершины имеют по 3 связи. Это в свою очередь

определяет разбиение графа параллелоэдра алмаза $\{6,3\}_{2,1}^3$ на непересекающиеся м. П., содержащие вершины этого особого гексацикла. Параллелоэдр алмаза – центросимметричен, поэтому множество м. П. должно быть разбито на два подмножества, в каждом из которых содержится по 3 вершины "внутреннего" гексацикла. Эти три вершины могут принадлежать лишь двум непересекающимся м. П., из которых один содержит одну, а второй – две вершины "внутреннего" гексацикла. Таким образом, граф $\{6,3\}_{2,1}^3$ параллелоэдра алмаза может быть единственным образом разбит на четыре м. П., два из которых (типа V_1) содержат по одной вершине внутреннего гексацикла, а два (типа V_{II}) – по две (рис.5.2a).

Параллелоэдр алмаза однозначно разбивается на объединение частей $\langle 110 \rangle$ - цепочек и, следовательно, его трансляция на вектор $(a+b)/2$ ГЦК – решетки приведет к образованию $\langle 110 \rangle$ - канала K_1 из четырех $\langle 110 \rangle$ - цепочек: двух типа V_1 и двух типа V_{II} . Группой симметрии K_1 является стержневая группа pnm = $\{(a+b)/2\} \{(a+b)/4 | m\} \{0 | m\} \{0 | m\}$ – подгруппа пространственной группы $Fd3m$ структуры алмаза. Относительно группы $Fd3m$ все $\langle 110 \rangle$ - цепочки, конечно, эквивалентны; но они разбиваются на два класса неэквивалентности V_1 и V_{II} (редукция по подгруппе [270]) относительно ее подгруппы pnm . Это и определяет различие в K_1 (только в K_1 , а не во всей структуре алмаза) групп точечной симметрии ($mm2$ и m) цепочек V_1 и V_{II} ; в цепочке V_1 чередуются вершины с 2 и 4 связями, а в цепочке V_{II} все вершины имеют по 3 связи (рис.5.2б).

Трансляции ГЦК – решетки: $(a+c)/2$, $(b+c)/2$ и $(a+b)/2 + (b+c)/2$ совмещают в K_1 цепочку V_1 с цепочками V_{II} , V_{II} и V_1 ; поэтому структуру алмаза можно представить в виде двумерной гексагональной решетки $\langle 110 \rangle$ - каналов:

$$D_3^+ = D_3 \cup [1]D_3 = F \cdot P_{2|3}(D_3^+) = hK_1 = \{K_i = t_i K_1 \mid t_i \in h\}, \quad (5.11)$$

где $F = \{(a+b)/2, (a+c)/2, (b+c)/2\} \triangleright h = \{(a+c)/2, (b+c)/2\}$. Каждая $\langle 110 \rangle$ - цепочка в этой решетке принадлежит четырем каналам, при этом ее тип в соседних каналах чередуется. В силу (5.11), отображение $\langle 110 \rangle$ - цепочки в точку отображает K_1 в ромб с углами 60° и 120° , зачернение или незачернение которых символизирует тип V_1 или V_{II} цепочки. Структура алмаза отображается при этом в решетку декорированных ромбов, сборка которой определяется правилами: каждая вершина принадлежит четырем ромбам с чередующимся зачернением углов при этой вершине (рис.5.2б). Итак, структура алмаза разбивается на каналы из параллелоэдров, которые отображаются в 2-мерную решетку декорированных каналов. Параллелоэдр алмаза представляет собой часть $\langle 110 \rangle$ -канала, которую образуют 4 непересекающиеся цепочки – две 2-реберные (I-тип) и две 3-реберные (II-тип) (рис.5.2а). В структуре алмаза эти цепочки представляют собой часть $\langle 110 \rangle$ -цепочек. Поэтому, если

рассматривать $<110>$ -канал в алмазе (т.е. объединение цепочек, чьи осевые линии расположены на поверхности цилиндра с осью $<110>$), то в цепочке I типа идет чередование 4 и 2-координированных вершин, а в цепочке II типа все вершины 3-координированные (рис.5.2б). При проектировании $<110>$ -канала на плоскость $<110>$ цепочка отображается в точку, а $<110>$ -канал в ромб с углами 60° и 120° , зачернение или незачернение которых, символизирует тип I или II цепочки. Структура алмаза отображается при этом в сетку декорированных ромбов, с чередующимся заполнением углов при каждой вершине, которая принадлежит 4 ромбам (рис.5.2б).

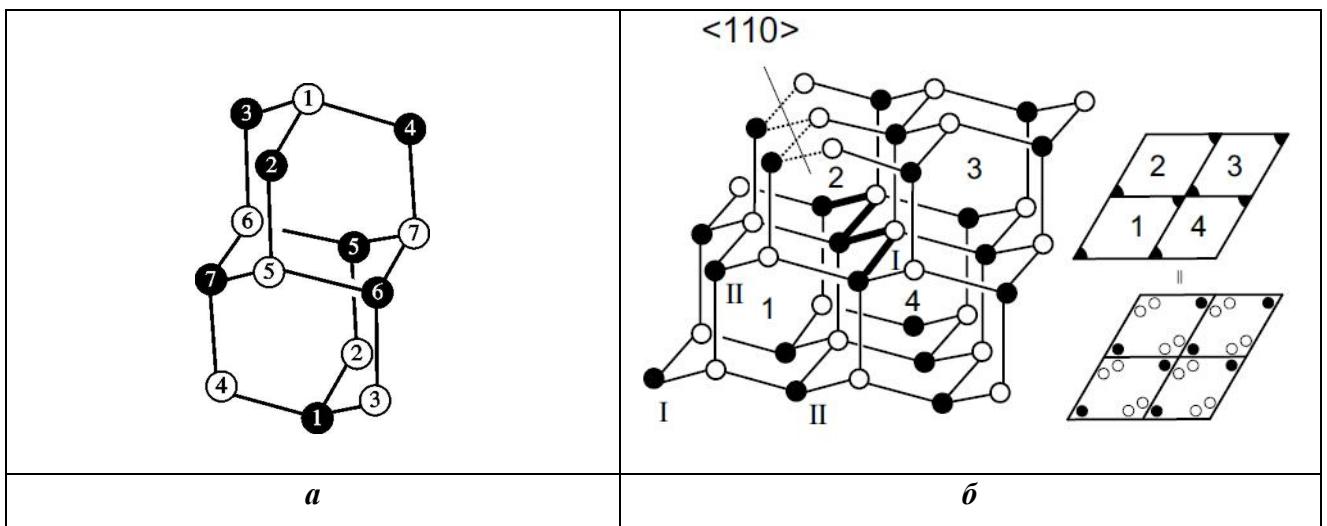


Рис.5.2.
(а) Параллелоэдр алмаза как объединение двух цепочек типа I и двух цепочек типа II.
(б) Отображение структуры алмаза в решетку декорированных ромбов, узел которой соответствует $<110>$ -цепочке алмаза. Тип (I или II) этой цепочки (в $<110>$ -канале) определяется зачерненным или пустым углом ромба. $P_{2|3}(D_3^+)$ показан в $<110>$ -канале K_1 двойными линиями. Замена зачерненных (незачерненных) углов ромбов черными (белыми) точками приводит к орбите точек группы обобщенной симметрии Виттке-Гарридо $P6mm/Pmm2$.

5.3. Представление кластера, генерирующего стержень алмазоподобной структуры декорированным полигоном

Энантиоморфный (правый) политоп $\{240\}_R$ состоит из каналов $\{30/11\}_R$, каждый из которых в свою очередь состоит из трех цепочек, возникающих при закручивании вправо $<110>$ - цепочки алмаза. Определяемая осью 30/11 группа симметрии канала является подгруппой группы симметрии тетракоординированного политопа $\{240\}_R$, поэтому (в силу

редукции по подгруппе) все вершины в этих цепочках имеют лишь по 3 связи (по отношению к $\{30/11\}_R$, а не ко всему $\{240\}_R$). Это означает, что рассматриваемые цепочки относятся к типу II и их можно обозначить R_{II} . Аналогичные цепочки из левого политопа $\{240\}_L$ мы будем обозначать L_{II} . Политоп $\{240\}_R$ содержит и каналы $\{40/9\}_R$, состоящие из четырех цепочек R_I .

В графе $\Gamma(\text{ПК}_{30/11})$ как и в $\Gamma(\text{ПК}_D)$ можно выделить единственный внутренний гексацикль, все вершины которого трехкоординированы. Это означает существование единственного разбиения $\Gamma(\text{ПК}_{30/11})$ на три м. П., каждый из которых содержит по две вершины из этого гексацикла.

Для "менее симметричных" ПК, чем ПК_D и $\text{ПК}_{30/11}$, разбиение $\Gamma(\text{ПКА})$ на непересекающиеся м. П. происходит более сложно и не всегда возможно. Выделенными (или поперечным) в них являются пента и гептацикли, а также гексацикли с максимальным числом трех- и четырехкоординированных вершин. $\langle 110 \rangle$ - цепочки I типа содержат нечетное, а II типа - четное число вершин поперечного цикла. Отображение $R_{I,II}$ ($L_{I,II}$) цепочек в точку приводит к отображению ПКА в декорированный полигон, все $n = 3,4,5$ вершин которого являются вершинами правильного гексагона; тип цепочки указан зачернением (не зачернением) угла в 60° , 120° и 180° , а энантиоморфизм цепочки - смещениями вправо (влево) дужками. Декорированные полигоны, соответствующие определенным ПКА, приведены в Табл.5.1. Необходимо отметить, что возможны цепочки и иных чем I, II типов, а также комбинирование R и L цепочек в одном ПКА.

Если ограничиться цепочками типов I и II, то разбиение ПКА на непересекающиеся м. П. может быть отображено в его символе:

$$\text{ПКА} = Z^q N / \lambda_f, v_e, \quad N_1 = Z^q I^{n_i}, II^{n_j} / \lambda_f, v_e, N_1, \quad (5.12)$$

где $N = \sum_{i,j=1}^5 n_i + n_j$, $0 \leq n_i, n_j \leq 5$; n_i, n_j - число вершин в цепочке данного типа, расположенной

в порядке обхода внутреннего (поперечного) цикла.

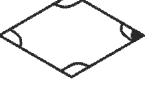
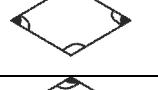
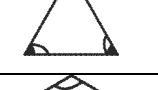
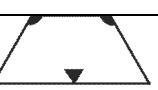
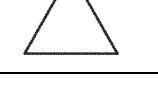
Например:

$$\Gamma(\text{ПК}_D) = Z^1 I^3, II^4, I^3, II^4 / 0, 6, 0; 6, 8, 0; 7 \quad \Gamma(\text{ПК}_{30/11}) = Z II^4, II^5, II^5 / 0, 6, 0; 6, 8, 0; 7$$

$$\Gamma(\text{ПК}_{40/9}) = Z I^3, I^3, I^3, I^5 / 0, 6, 0; 7, 6, 1; 7$$

Таблица 5.1.

**Представление порождающих кластеров тетракоординированных структур
декорированными полигонами**

№	Символ ПК	Символ в табл.4.1	<110>-цепочки, входящие в ПК					Декорированные полигоны
1	$30\diagup_{11}^{dc}$	$A_{4,12}$	R_2	R_2	R_2	R_1		
2	K	$A_{5,5}$	R_1	R_2	R_1	L_2		
3	$40\diagup_9$	$A_{5,7}$	R_1	R_1	R_1	R_1		
4	$40\diagup_9^{dp}$	$A_{5,8}$	R_1	R_1	R_1	R_2		
5	$30\diagup_{11}$	$A_{7,7}$	R_2	R_2	R_2			
6	$40\diagup_9^{dc}$	$A_{7,10}$	R_1	R_1	R_1			
7	A_3^R	$A_{7,12}$	R_1	R_2	R_1	R_2		
8	L_3^R	$A_{7,12}$	R_1	R_1	R_2	R_2		
9	L_2	$A_{11,11}$	V_2	V_2	V_2			
10	A_2	$A_{12,12}$	V_1	V_2	V_1	V_2		
11	L_3	$A_{12,12}$	V_1	V_1	V_2	V_2		
12	LB^{dp}	$A_{13,13}$	R_1	R_1	R_2	R_1	R_1	
13	LB^{dpdp}	$A_{13,14}$	V_1	V_2	V_1	V_1	V_2	
14	$30\diagup_{11}^{ddc}$	$A_{14,14}$	R_2	R_1	R_2	R_1	R_2	
15	$30\diagup_{11}^{dp}$	$A_{16,17}$	V_2	V_1	V_2			

5.3.1. Представление алмазоподобной структуры, допускающей аппроксимацию объединением стержней, разбиением плоскости на декорированные полигоны

Подобно параллелоэдру алмаза и другие ПК могут быть разбиты на объединения цепочек типа I и II и, следовательно, генерировать каналы. При проектировании на плоскость такие каналы отображаются в декорированные полигоны, все $n=3,4,5$ вершин которых являются вершинами правильного гексагона, а тип цепочки указан зачернением или незачернением угла в 60° , 120° и 180° . Итак, каналу, генерируемому ПК, сопоставляется декорированный полигон, а объединение каналов в АС происходит по закону «алмазной сборки»: каждая вершина является общей для 4 полигонов, зачерненные и незачерненные углы при этой вершине чередуются. Закон "алмазной сборки" представляет собой локальные правила объединения $<110>$ -цепочек, аналогичные правилам для сборки политопов, квазикристаллов и т.п. из полиэдров [6].

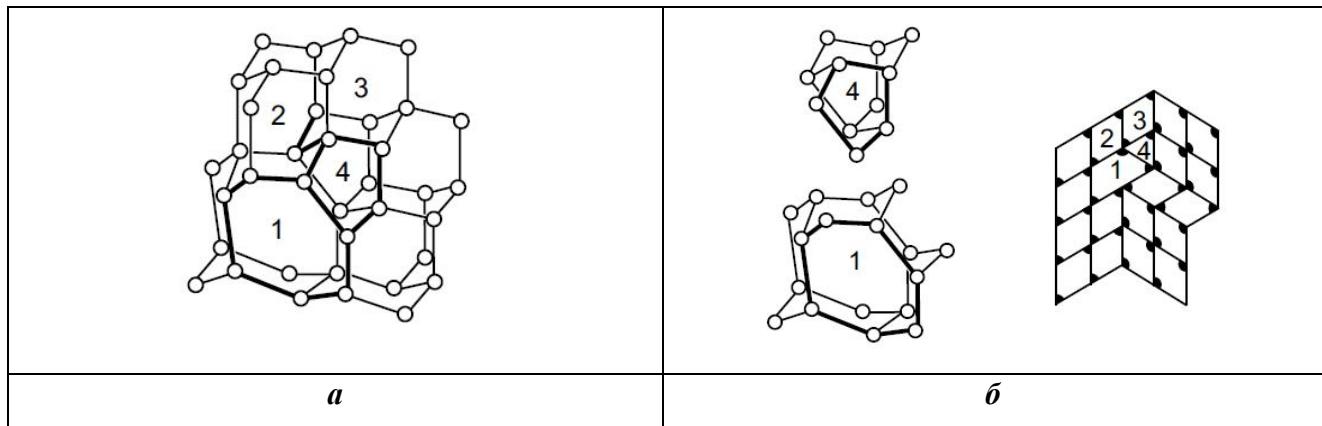


Рис.5.3.

(*a*) Краевая дислокация с плоскостью скольжения (100) в алмазе [262].

(*b*) ПК с поперечными пента- и гептациклами. Пента- и гептацикли выделены жирными линиями. Разбиение плоскости на декорированные полигоны, соответствующее краевой дислокации (*a*).

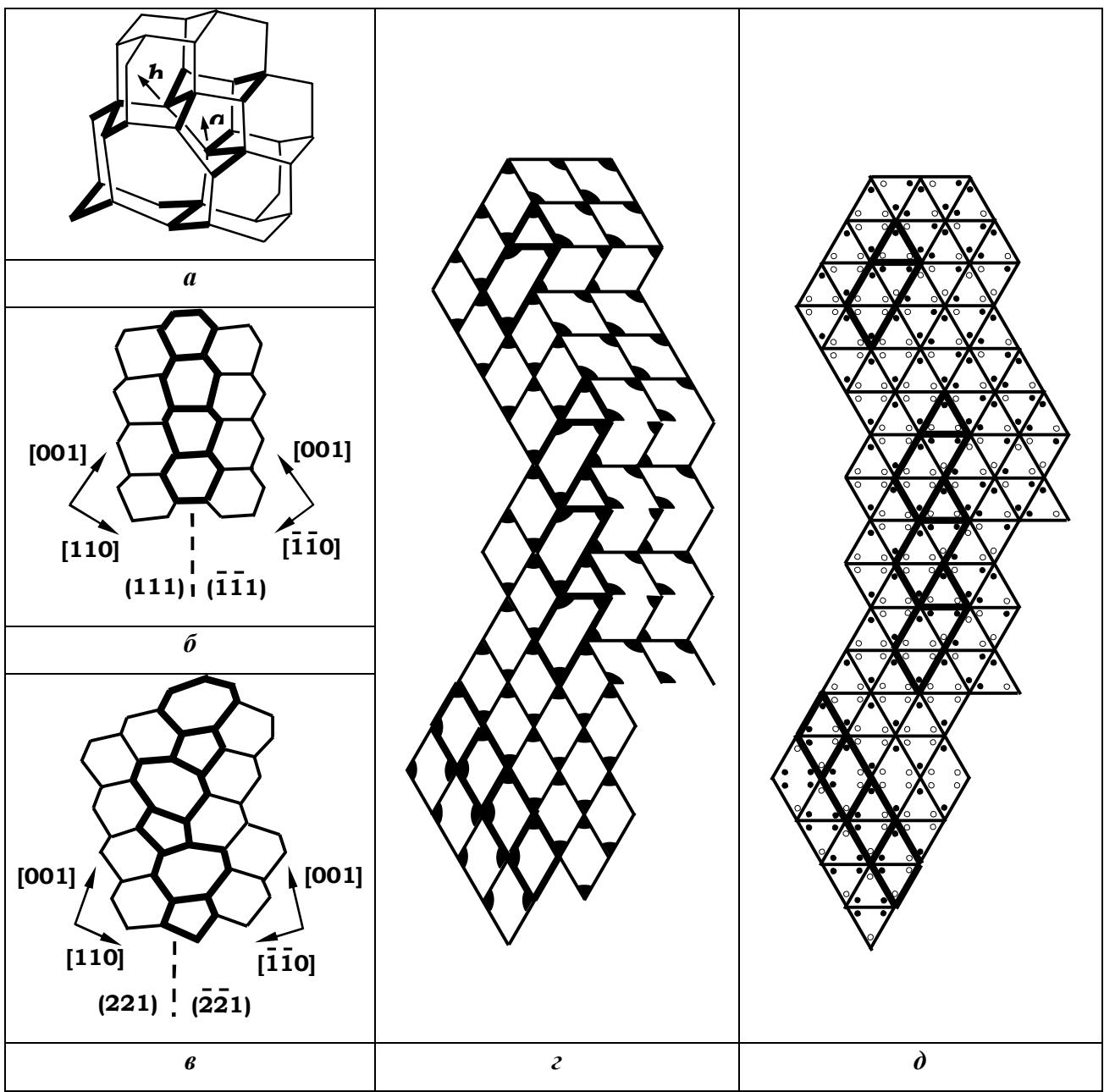


Рис.5.4.

- (а) Краевая дислокация с плоскостью скольжения (100) в алмазе [262].
- (б), (в) Межзеренные границы в алмазе [263].
- (г) Разбиение плоскости на декорированные полигоны, соответствующее реальной структуре алмаза, содержащее и краевую дислокацию (а), и межзеренные границы (б), (в).
- (д) Замена зачерненных (незачерненных) углов ромбов черными (белыми) точками приводит к орбите точек группы цветной симметрии Витке-Гарридо Р6mm/Pmm2.

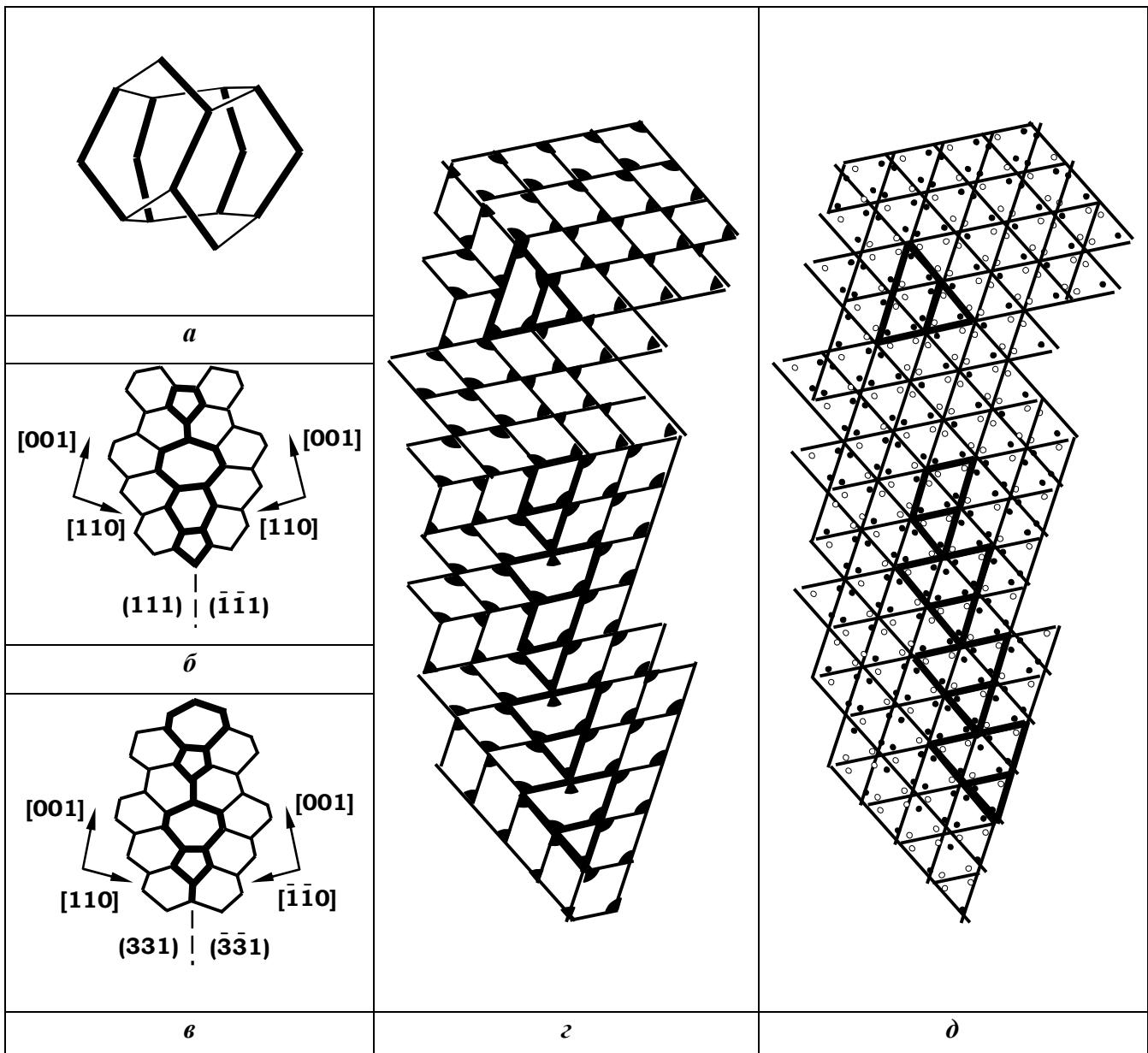


Рис.5.5.

- (*a*) Ядро винтовой дислокации в алмазе [262].
- (*б*), (*в*) Межзеренные границы в алмазе [263].
- (*г*) Разбиение плоскости на декорированные полигоны, соответствующее реальной структуре алмаза, содержащее и краевую дислокацию (*а*), и межзеренные границы (*б*), (*в*).
- (*д*) Замена зачерненных (незачерненных) углов ромбов черными (белыми) точками приводит к орбите точек группы цветной симметрии Витке-Гарридо P6mm/Pmm2.

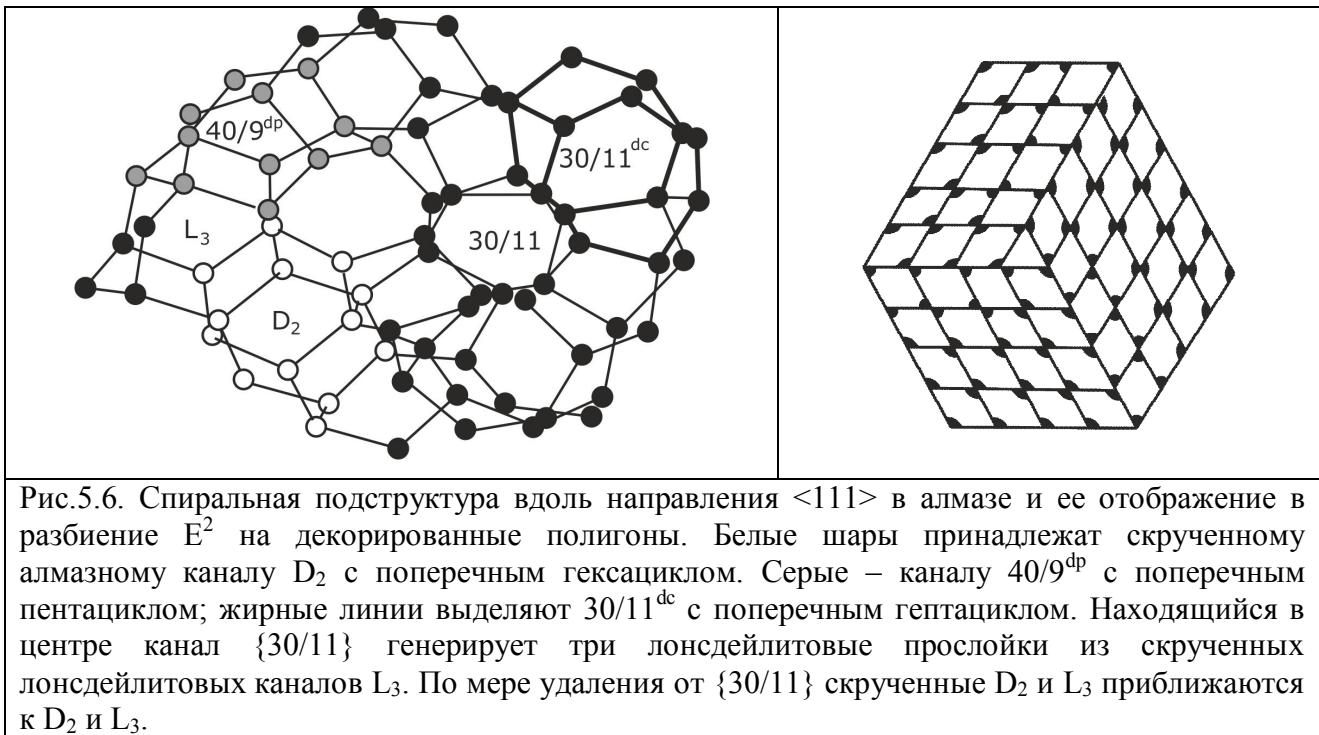


Рис.5.6. Спиральная подструктура вдоль направления $<111>$ в алмазе и ее отображение в разбиение E^2 на декорированные полигоны. Белые шары принадлежат скрученному алмазному каналу D_2 с поперечным гексациклом. Серые – каналу $40/9^{dp}$ с поперечным пентациклом; жирные линии выделяют $30/11^{dc}$ с поперечным гептациклом. Находящийся в центре канал $\{30/11\}$ генерирует три лонсдейлитовые прослойки из скрученных лонсдейлитовых каналов L_3 . По мере удаления от $\{30/11\}$ скрученные D_2 и L_3 приближаются к D_2 и L_3 .

5.3.2. Группы цветной симметрии разбиений плоскости на декорированные полигоны

Все декорированные полигоны из Табл.5.1 вкладываются в правильный гексагон, поэтому их сборка по локальным математическим правилам ($ЛМП_D$) сводится к определенному варианту расстановки черных и белых точек у вершин каждого треугольника мозаики $\{3,6\}$. Множество этих точек образует орбиту одной из младших групп W - симметрии $P6mm^{(W)}$ изоморфной группе симметрии $P6mm$ плоской гексагональной решетки. Алмазу соответствует группа $P6mm^{(W)}$ с наибольшей подгруппой симметрии - группа Виттке-Гарридо, определяемая символом $P6mm/Pmm2$ [271]. Для учета отмечаемой дужками в Табл.5.1 неэквивалентности цепочек V и $R(L)$ группа W -симметрии $P6mm^{(W)}$ должна быть заменена группой двойной W -симметрии $P6mm^{(W1,W2)}$. Изоморфизм двумерных групп $P6mm$ и $P6mm^{(W1,W2)}$ означает, что структуры, собираемые по $ЛМП_D$ из ПКА Табл.5.1, определяются в рамках расширенной федоровской симметрии, и, следовательно, "совместимы" с кристаллами. Двумерность же этих групп означает, что эта совместимость достигается лишь при сборке из линейных подструктур - каналов. Иными словами, априори определяемые ПК из Табл.5.1 позволяют по $ЛМП_D$ собрать структуры (систем) линейных дефектов в кристаллах: дисклинаций, двойниковых границ, межзеренных границ, и т.п. [9, 262, 263].

5.4. Полиэдр, разбитый на декорированные полигоны, как база расслоения Хопфа, определяющего объединение стержней в детерминированную некристаллическую алмазоподобную структуру (ДНАС)

Сборка упорядоченных некристаллических АС определяется конструкциями алгебраической геометрии. Известно, что алмаз в S^3 - "политоп" $\{240\}$ представляет собой объединение двух политопов $\{3,3,5\}$. Политоп $\{3,3,5\}$ в свою очередь, определяется разбиением на пентагональные призмы [6], которое может быть задано картой $\{4,4\}_{5,0}$ на торе [177]. Объединение двух карт $\{4,4\}_{5,0}$ задает карту $\{4,4\}_{5,5}$ на торе с 50 вершинами 100 ребрами и 50 квадратными гранями (рис.5.7 a), которая определяет нерегулярное разбиение сферы $\{4,4\}_{5,5}^4$ с 50 вершинами, 96 ребрами и 48 квадратами (рис.5.7 b).

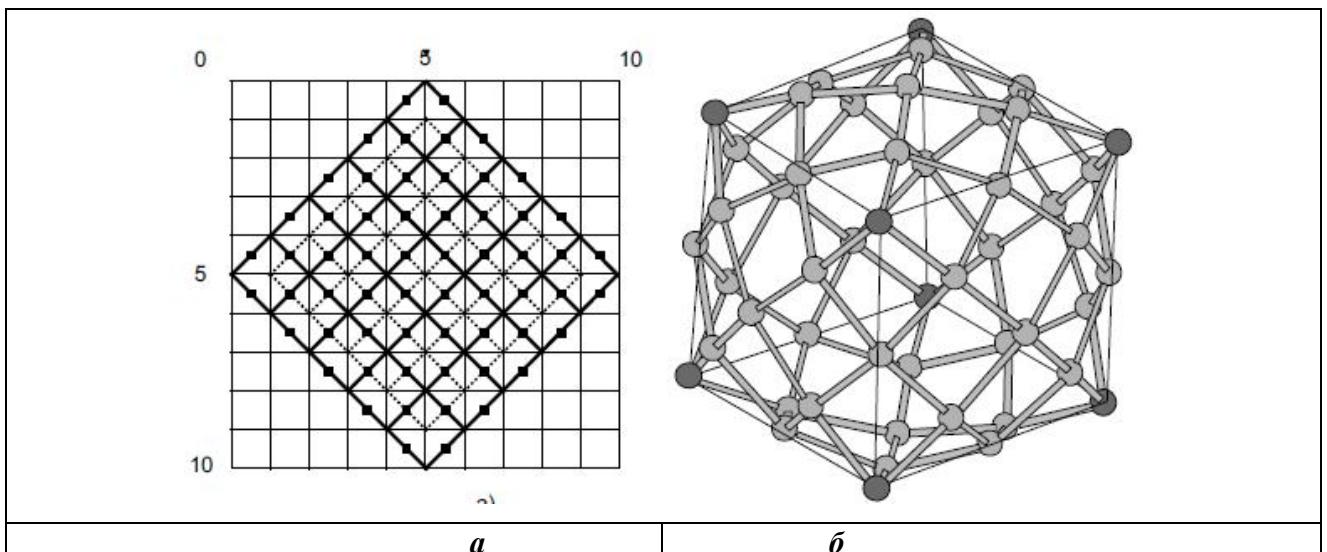


Рис.5.7.

- (a) Карта $\{4,4\}_{5,5}$ на торе с 50 вершинами 100 ребрами и 50 квадратными гранями.
- (b) Нерегулярное разбиение сферы $\{4,4\}_{5,5}^4$ с 50 вершинами, 96 ребрами и 48 квадратами.

Каждая $\langle 110 \rangle$ -цепочка АС (которой соответствует слой в расслоении Хопфа для некоторого алмазоподобного политопа) состоит из "белой" и "черных" линейных цепочек, поэтому их "общим представителем" является линия, проходящая через середины ребер, соединяющих белые и черные вершины (рис.5.2 b). Можно показать, что если АС соответствует объединению "белой" и "черной" карты на сфере, то представлению АС как единого "черно-белого" объекта, будет соответствовать карта, дуальная этому объединению карт. Иными словами, карта $(\{4,4\}_{5,5}^4)^*$ – дуальная карте $\{4,4\}_{5,5}$, должна соответствовать расслоению Хопфа для алмазоподобного политопа. Действительно, для карты $(\{4,4\}_{5,5}^4)^*$

выполняется закон алмазной сборки – в каждой вершине сходится по 4 полигона, и поэтому ее можно рассматривать как отображение на сферу расслоения Хопфа для алмазоподобного политопа (рис.5.8 α). В этом случае 48 вершин ($\{4,4\}_{5,5}^4$)^{*} соответствуют точкам базы расслоения, каждая из которых нагружена точками слоя, принадлежащими одной <110>-цепочке.

Отображение расслоения Хопфа на сферу для 120 вершин политопа {3,3,5}, можно рассматривать как икосаэдр базы, каждая вершина которого нагружена 10 точками слоя. Политопу {240} соответствует кубооктаэдр (рис.5.8 α), каждая вершина которого нагружена 20 точками одной <110>-цепочки. При таком же, как у этих политопов 20-вершинном слое, карта ($\{4,4\}_{5,5}^4$)^{*} из декорированных полигонов должна соответствовать расслоению Хопфа для "политопа" {960} с $48 \cdot 20 = 960$ вершинами. В таком политопе между каналами 30/11 и алмазными D возникают каналы "5" и "7" с поперечными пента- и гептациклами (рис.5.8 δ).

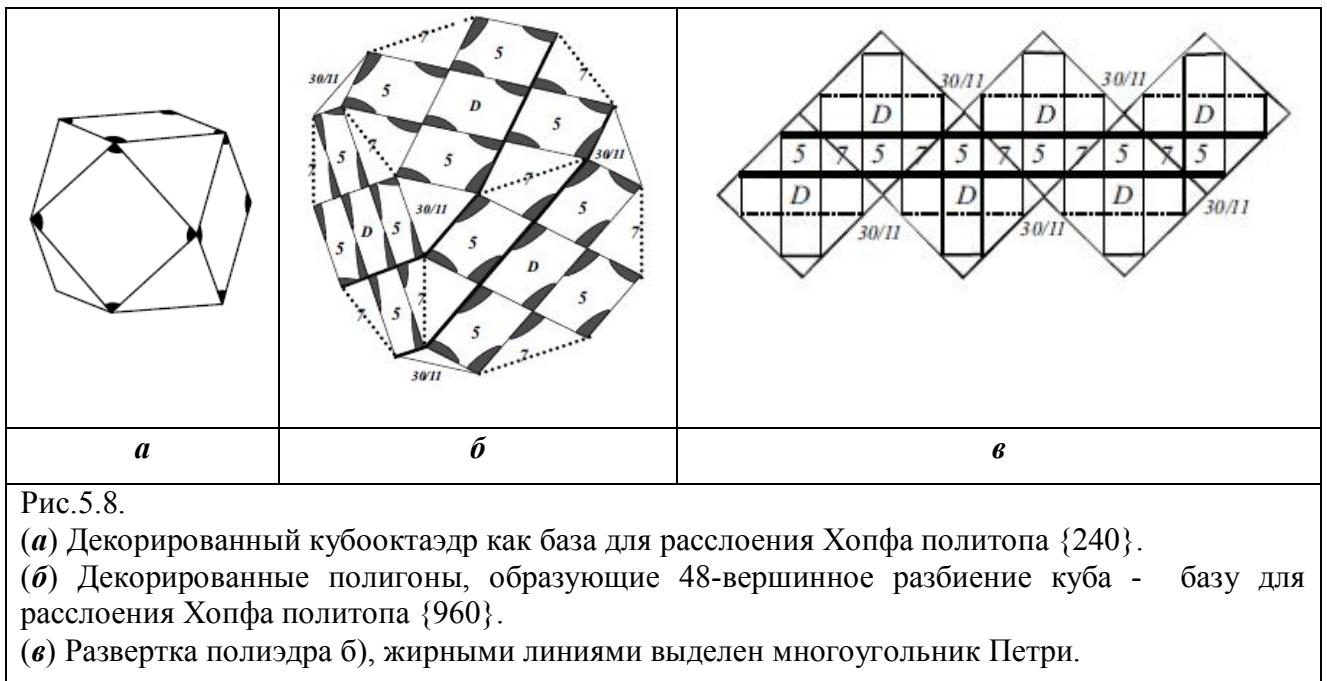


Рис.5.8.

- (α) Декорированный кубооктаэдр как база для расслоения Хопфа политопа {240}.
- (β) Декорированные полигоны, образующие 48-вершинное разбиение куба - базу для расслоения Хопфа политопа {960}.
- (γ) Разворотка полиэдра б), жирными линиями выделен многоугольник Петри.

Многоугольник Петри развертки куба совпадает с многоугольником Петри квадратной решетки, поэтому отображение политопа {960} в бесконечный стержень в E^3 возможно только вдоль многоугольника Петри развертки "куба" (рис.5.8 γ) Сопоставив каждой вершине ленты, выделенной пунктиром на рис.5.8 γ , определенным образом расположенную <110>-цепочку, получим детерминированную некристаллическую алмазоподобную структуру (ДНАС), представленную на рис.5.9.

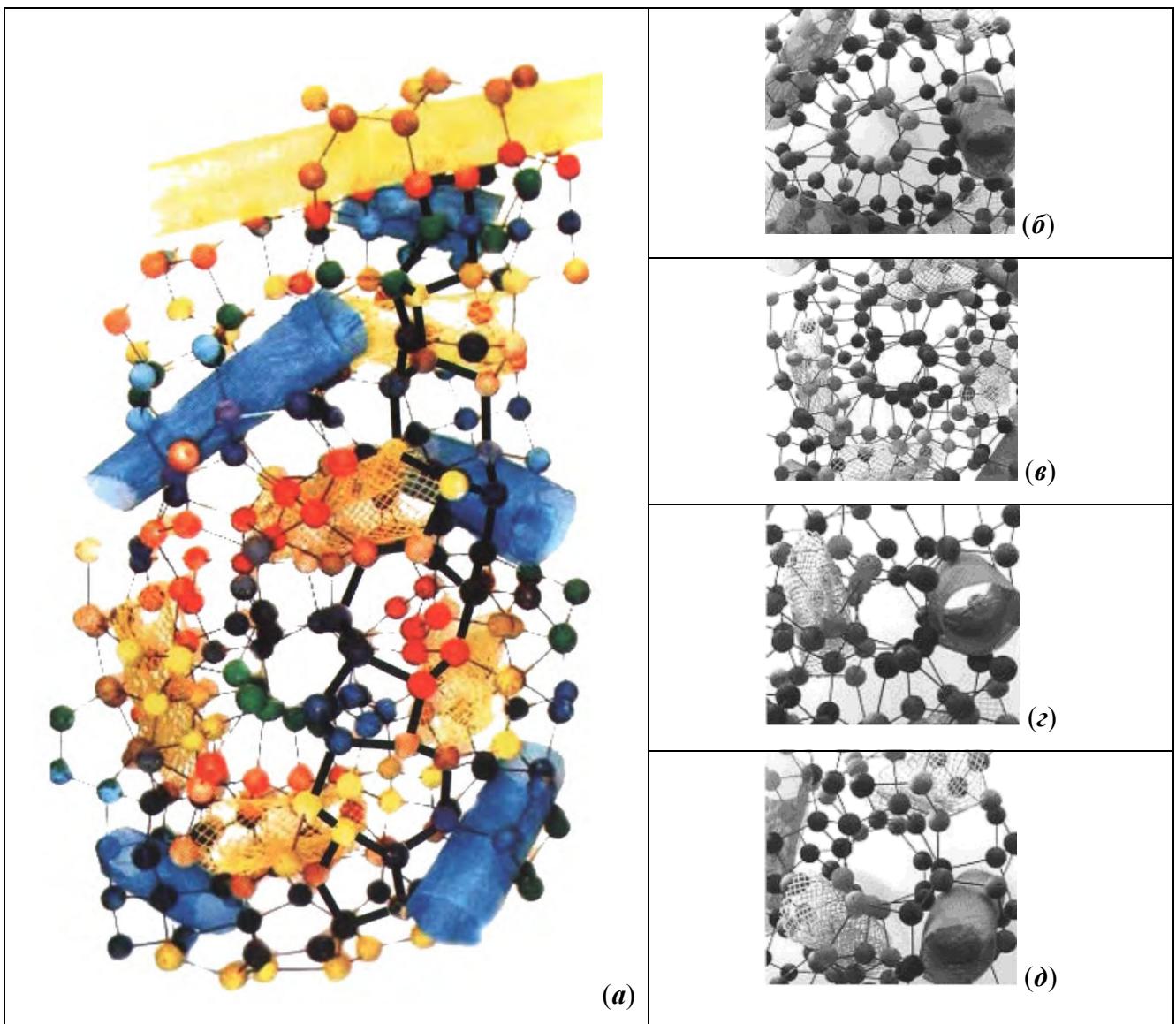


Рис.5.9.

(а) Модель детерминированной некристаллической алмазоподобной структуры — спираль из спиралей, образованная изолированными друг от друга скрученными алмазными каналами (синие трубы) и каналами 30/11 (желтыми трубками). В один из каналов (почти перпендикулярном вертикальной оси модели) синяя трубка не вставлена. Жирными линиями показано объединение каналов с «поперечными» пента- и гептацикликами, которые возникают в промежутках между синими и желтыми трубками и соответствуют 5- и 7-вершинникам центральной полоски на рис. 5.8в.

(б), (в), (г), (д) - скрученный алмазный канал, канал 30/11, канал с поперечным пентациклом, канал с поперечным гептациклом.

5.5. Трехкоординированное разбиение плоскости, определяемое особой подсистемой системы E_8

Каждому из 240 векторов первой координационной сферы E_8 , которые определяют вершины 8-мерного политопа Госсета, можно сопоставить пару кватернионов, задающих

октаву [16]. Это позволяет разбить 240 векторов на десять 24-векторных подмножеств P_1, \dots, P_{10} (рис.5.10):

$$P_1 = (T_2, 0), \quad P_2 = (0, T_2); \quad P_{3-6} = (T_1, \pm(1, i)T_1) \quad P_{7-10} = (T_1, \pm j(1, i)T_1), \quad (5.13)$$

где $i^2=j^2=k^2=-1$, $ji=k$, $T_1=\frac{1}{2}\{\pm 1, \pm i, \pm j, \pm k; \frac{1}{2}(\pm 1, \pm i, \pm j, \pm k)\}$ – группа Гурвица единичных кватернионов, $T_2=(1+i)T_1$. Каждое подмножество P_n соответствует 4-мерному политопу $\{3,4,3\}$, центр которого размещен в одной из десяти вершин 5-мерного аналога октаэдра – политопа $\{3,3,3,4\}$. Подобное соответствие определяется расслоением Хопфа: $S^7 \rightarrow S^4$ (слой S^3), которое является главным расслоением для группы $SU(2)$ и ассоциированным – для группы $SO(4)$. Инварианты $SU(2)$ соотносятся с алгеброй группы $SO(3,1)$, описывающей конформные преобразования на сфере S^2 [15, Т.1]. Чтобы перейти от многообразия $SU(2)$ к решетчатому многообразию, определяемому E_8 , необходимо задать 7-мерную поверхность, соответствующую многообразию гиперплоскостей и нормальных к ним единичных векторов в 10-мерном пространстве. Отметим, что такой подход соответствует десятикоординатной форме задания 240 векторов E_8 [231]. Единственным таким 7-мерным многообразием является многообразие Штифеля $V_{5,2}$, приводящее к расслоению вида:

$$V_{5,2} \rightarrow S^4 \text{ (слой } V_{4,1}), \quad (5.14)$$

где $V_{4,1} \cong S^3$. Само многообразие $V_{4,1}$ (после комплексификации) является универсальным накрытием для многообразия Грассмана $G^c_{2,1}$, которое отвечает серединам минимальных геодезических (аналогов прямых в евклидовом пространстве) группы $SU(2)$. В рассматриваемом случае многообразие таких геодезических определяется пересечением группы и ее алгебры: $SU(2) \cap su(2)$, где $su(2)$ – алгебра [15, Т.1].

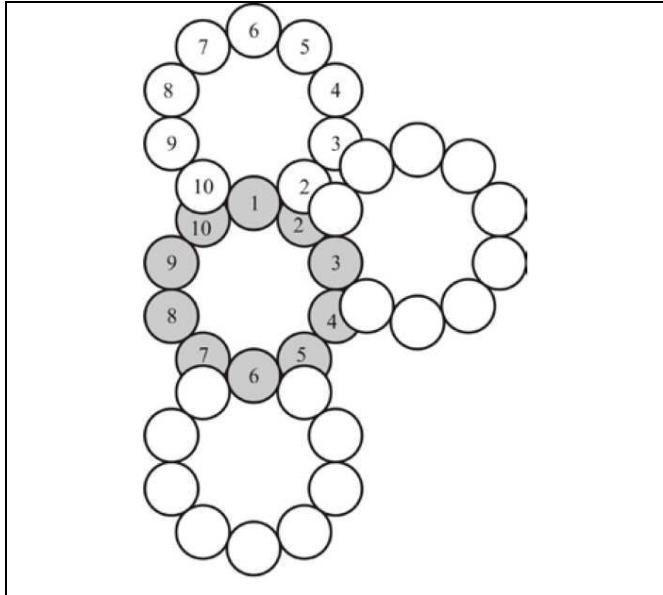


Рис.5.10. Первая координационная сфера решетки E_8 показана как объединение 10 серых кружков, соответствующих 24-векторным подсистемам системы E_8 . Вторая координационная сфера представлена как объединение 10 конгруэнтных первых координационных сфер (на рис. показаны лишь 3). Номер каждой из таких сфер совпадает с номером единственного серого кружка, который принадлежит и исходной первой координационной сфере.

Середины (множество) ребер политопов соотносятся с геодезическими, образующими минимально геодезические подмножества. Объединению P_{3-6} и P_{7-10} соответствует 96-вершинный 4-мерный алгебраический политоп, определяемый подсистемой $H_4(24)$ некристаллографической системы $H_4(30)$ из 120-векторов. По конструкции Госсета [24], от 96-вершинной подсистемы $H_4(24)$ можно перейти к подсистеме $A_4(24)$ системы $A_4(30)$, определяющей 4-мерный полурегулярный политоп $Sn\{-3,4,3\}$, вершинами которого являются 96 середин ребер политопа $\{3,4,3\}$. Таким образом, $Sn\{-3,4,3\}$ представляет собой конструкцию (рис.5.11 a), которая удовлетворяет всем необходимым алгебраическим и топологическим требованиям при отображении в E^3 из E_8 в соответствии с (5.14). Такое определение $Sn\{-3,4,3\}$ позволяет использовать соотношение "алгебра – подалгебра", которое является более общим, чем "группа-подгруппа".

Системами корней полупростых алгебр Ли, которые порождают 3-мерные вещественные векторные пространства, являются только B_3 и A_3 . Первыми координационными сферами соответствующих примитивной кубической и ГЦК решеток являются октаэдр $\{3,4\}$ и кубооктаэдр $\begin{Bmatrix} 3 \\ 4 \end{Bmatrix} = \{3/4\}$, вершины которого являются серединами

ребер октаэдра. Из 24 вершин политопа $\{3,4,3\}$ половина принадлежит "экваториальному" кубооктаэдру $\{3/4\}$, расположенному на "экваторе" S^3 , а половина – октаэдрам, находящимся по обе стороны от него (рис.5.11 a). При отображении 96 вершин $Sn\{-3,4,3\}$ на S^2 им можно сопоставить середины 24 ребер экваториального кубооктаэдра $\{3/4\}$, которые образуют ромбокубооктаэдр $Sn\{-3/4\}$ (рис.5.11 b). Середины ребер $Sn\{-3/4\}$ образуют 48-вершинное

объединение $\text{Sn}^2\{-3/4\}$ двух 24-вершинных орбит группы O_h : $O_h / C_{1V} = \bigcup_{i=1}^{24} g_i C_{1V}$ и $O_h / C_{1V}^d = \bigcup_{i=1}^{24} g_i C_{1V}^d$, где C_{1V} и C_{1V}^d - подгруппы координатной и диагональной плоскостей симметрии куба (рис.5.11б).

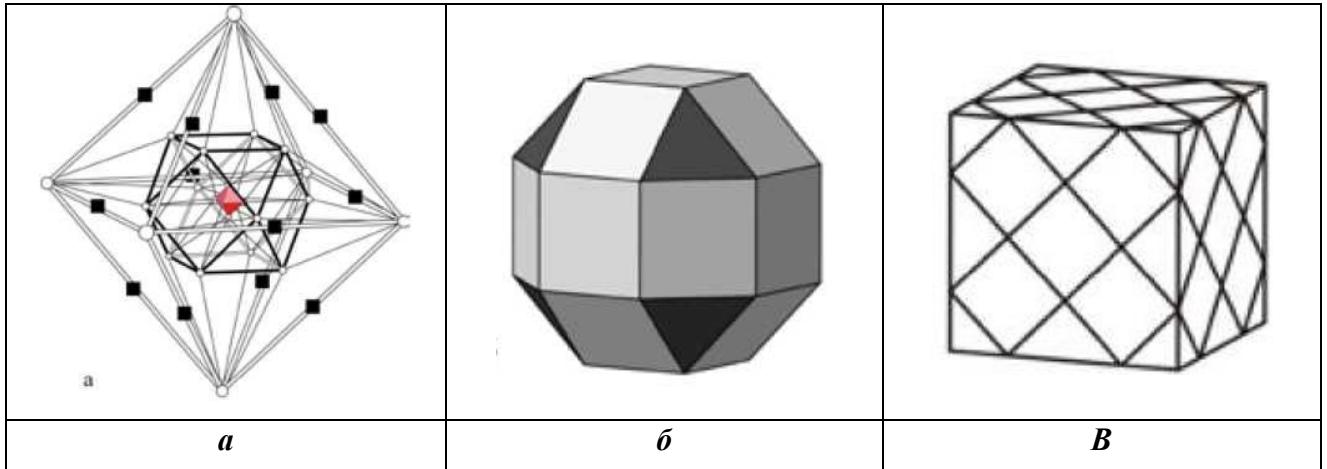


Рис.5.11. Отображения конструкций, определяемых полигонами, в разбиения сферы.

- (а) Проекция в E^3 полигонов $\{3,4,3\}$. «Экваториальный» кубооктаэдр выделен жирными линиями, середины ребер внешнего октаэдра из $\{3,4,3\}$ показаны квадратиками. Внутренний октаэдр показан красным.
- (б) Ромбокубооктаэдр, вершинами которого являются середины ребер кубооктаэдра.
- (в) 48-вершинное разбиение поверхности усеченного куба на «квадраты» и треугольники.

Можно показать, что возможно отображение 96 вершин $\text{Sn}\{-3,4,3\}$ в 48 вершин $\text{Sn}^2\{-3/4\}$ таким образом, чтобы двум векторам из P_{3-6} соответствовала одна вершина $\text{Sn}^2\{-3/4\}$:

$$P_{3-6} = P_{3,4} \cup P_{5,6} = (T_1, \pm T_1) \cup (T_1 \pm iT_1) \rightarrow \text{Sn}^2\{-3/4\} = O_h / C_{1V} \cup O_h / C_{1V}^d \quad (5.15)$$

Полигон $\text{Sn}\{-3,4,3\}$ – промежуточная конструкция при отображении из E_8 , поэтому необходимо использовать возможности получения векторных систем посредством их “вырезания” диском D_0^2 из системы E_8 [72]. При последующем введении для таких систем групп Вейля W с инвариантами I , образующими “эйлеров” набор вида $(2, I_1, I'_2, I'_3 = I_1 + I_2 - 2$, в общем случае, только I'_2 или I'_3 должен быть инвариантом), можно задать соответствующий многогранник. Например, $\{2,12,20,30\}$ – икосаэдр, $\{2,12,14,24\}$ – кубооктаэдр, $\{2,20,12,30\}$ – додекаэдр, $\{2,14,12,24\}$ – ромбододекаэдр. В такой системе записи заложены числа вершин,

ребер и граней, так что становится возможным рассмотрение различных типов расширения групп полиэдров посредством снятия вырождения для вершин, ребер и граней. Группа W , порождаемая инволютивным множеством S , обладает следующим свойством. Если S разбито на два подмножества I, J , состоящих из попарно перестановочных элементов, тогда существует прямое произведение соответствующих подгрупп $W_I \times W_J$ группы Вейля W . К таким разбиениям S относится, например, выделение подмножеств неподвижных точек [16, 30, 272]. Применяемое расширение групп является аналогом не только алгоритма построения бинарных групп многогранников, но и Миллеровых обобщений групп многогранников вида $\langle l, m, n \rangle_q$ с генетическим кодом $R^l = S^m = T^n = RST = Z^q$, $Z \leftrightarrow R, S, T$ [22]. Фактически используется расширение группы полиэдра элементом Z , который равен 1 в степени q и перестановчен (что коррелирует с вышеприведенным правилом разбиения корневых систем на подмножества) с элементами R, S, T . В рассматриваемом случае (5.15) две орбиты группы O_h будут соответствовать одной орбите расширенной группы, которую определяет фактор-группа одной из федоровских групп [22].

Вершины кубооктаэдра $\{2,12,14,24\}$ являются серединами ребер куба $\{2,8,6,12\}$ с ребром $2(a+b)$, на каждую грань которого попадает по 4 вершины $Sn-\{3/4\}$, а на каждое ребро - по 2 (рис.5.11б). Все 6 граней куба могут быть вложены в мозаику $\{4,4\}$ (с ребром $2(a+b)$) таким образом, что один из многоугольников Петри куба окажется частью многоугольника Петри мозаики $\{4,4\}$. Соответственно, все грани куба будут взаимно отображаться плоскостью скользящего отражения $g=\{m|2a\}$, которая проходит через середины ребер многоугольника Петри (рис.5.12а), а вершины $Sn^2-\{3/4\}$ будут принадлежать орбите федоровской группы $\{a+b, a-b\}4mm$. Нормализатором данной группы является федоровская группа $\{a,b\}4mm$, отображающая на себя мозаику $\{4,4\}_a$ (с ребром a), в вершины которой попадают вершины развертки $Sn^2-\{3,4\}$ (рис.5.12а).

При отображении векторов P_{3-6} в мозаику $\{4,4\}_a$:

$$P_{3,4} \cup P_{5,6} \rightarrow Sn^2-\{3/4\} = O_h/C_{1V} \cup O_h/C_{1V}^d \rightarrow \{a+b, a-b\}4mm/mm2, \quad (5.16)$$

две орбиты (5.15) отображаются в орбиту одной федоровской группы, причем вершине $\{4, 4\}_a$ соответствуют 2 вершины $Sn-\{3,4,3\}$, отличающихся лишь знаками вторых компонентов в каждой паре кватернионов из $P_{3,4}$ и $P_{5,6}$. Последнее означает, что каждую вершину $\{4, 4\}_a$, можно отождествить с серединой стрелки, которая соединяет 2 вершины, образующиеся при снятии вырождения с данной вершиной. Иными словами, в каждой вершине $\{4,4\}_a$ находится неподвижная точка группы $mm2$ (плоскости симметрии в которой

идут по диагоналям квадратов в $\{4,4\}_a$, а стрелка лежит в одной из двух плоскостей симметрии этой группы (рис.5.12б).

Для построения отображений в клеточные комплексы векторных наборов, отвечающих многранникам, и последующего применения расслоений необходимо использовать стабильные гомотопические классы и соответствующие спектральные ряды с учетом характеристических (топологических) чисел [15, Т.2]. При 10-мерном определении E_8 для соответствующих оснащенных многообразий реализуется требование $\pi_{7+3}(S^7) \cong Z_{24}$, где Z_{24} – абелева 24-элементная группа. Введение инволютивности в Z_{24} определяет ее подгруппу $\pi^{(2)}_{7+3}(S^7) \cong Z_8$. Операция вырезания диском D_0^2 , в конечном итоге, определяет наличие трех ближайших векторов для каждого отображаемого из E_8 в E^2 вектора, поэтому слой расслоения должен быть сформирован по модулю 3 (для поля Галуа GF_3) и в Z_{24} должна быть подгруппа $\pi_{7+3}^{(3)}(S^7) \cong Z_3$. Можно показать, что Z_{24} –абелева группа T_1^C из 24 диагональных матриц с элементами вида ± 1 , $\pm i$, $\pm \frac{1}{2}(1+i)$, $\pm \frac{1}{2}(1-i)$, которой соответствует калибровочная группа T_1 расслоения (2) над полем комплексных чисел (C). Следовательно, соотношение:

$$Z_{24} = Z_3 \times Z_8 \leftrightarrow C_3 \times D_{2h} \quad (5.17)$$

в итоге определяет требование соответствия отображения (5.14) t-схеме Штейнера $S(5,8,24)$. В $S(5,8,24)$ любые 5 точек из 24 всегда содержатся ровно в одной октаде, построение которой при проективных реализациях $S(5,8,24)$ осуществляется выделением 1,2 или 3 римских точек [16]. Для определяемого (5.17) отображения на плоскость последнее означает, что стрелки (которыми нагружены вершины мозаики $\{4,4\}_a$) должны быть соединены так, чтобы обеспечить трехкоординированное разбиение плоскости на 5=8-3, 6=8-2, 7=8-1 и 8-вершинники (рис.5.12б).

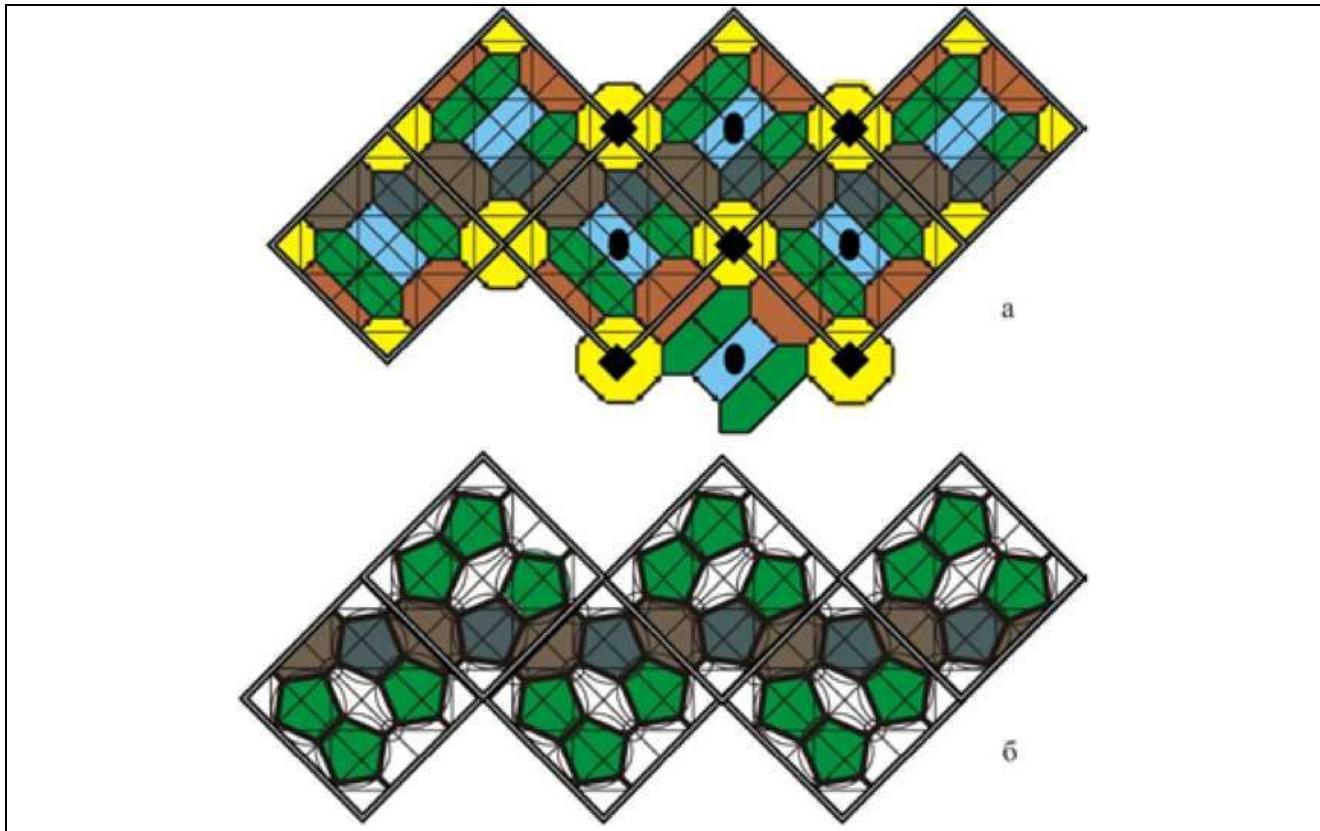


Рис.5.12. Отображение политопа $\{96\}$ в E^2 .

(*а*) Каждая вершина мозаики $\{4,4\}$ нагружена стрелкой, инвариантной относительно подгруппы симметрии $mm2$ ее вершины. Плоскости симметрии $mm2$ идут по диагоналям квадрата из $\{4,4\}$. Концы стрелок определяют трехкоординированное разбиение на 5-, 6-, 7- и 8-вершинники, показанные зеленым, голубым, коричневым и желтыми цветами. Темно-зеленым и темно-коричневым цветом выделены 5- и 7-вершинники центральной полоски, представляющей собой орбиту плоскости скользящего отражения g . Для одной элементарной ячейки федоровской группы показаны оси симметрии.

(*б*) Разбиение (*а*), в котором вершины многоугольников размещены на окружностях двух сортов: содержащих пентагон или стрелку. Показаны лишь 5-угольники и центральная полоска.

Всем указанным условиям отвечает 3-координированное разбиение плоскости $\{(5,5,6), (5,5,7), (5,6,7), (5,7,8)\}$, в вершинах которого сходятся по три 5, 6, 7, 8-вершинника. Вершины такого разбиения принадлежат орбите $\{4a,4b\}4bm/m$ федоровской группы $\{4a,4b\}4bm$ (рис.5.12*б*), а его уникальность подтверждается возможностью погружения в «аномальную равномерную мозаику, в которой полосы квадратов перемежаются полосами треугольников» [22]. (Федоровская группа $Cmm2=\{4a,4(a+b)\}mm2$ такой мозаики является подгруппой группы $\{4a,4b\}4bm$). Таким образом, при выполнении наложенных на (5.14) определенных алгебраических и топологических условий подсистема $E_8(24)$ из 192 векторов

[65] системы корней E_8 отображается в вершины 3-координированного разбиения плоскости на 5,6,7 и 8-вершинники (рис. 5.12 δ):

$$E_8(24) \rightarrow A_4(24) \rightarrow Sn^2 - \{3/4\} \rightarrow \{5,6,7,8\} \subset E^2, \quad (5.18)$$

где $Sn - \{3,4,3\} \subset S^3$, $Sn^2 - \{3/4\} \subset S^2$, $\{5,6,7,8\} = \{(5,5,6), (5,5,7), (5,6,7), (5,7,8)\}$.

5.5.1. Икосидодекаэдр, разбитый на декорированные полигоны, как база расслоения Хопфа, определяющего объединение стержней в ДНАС

Введение $+\pi/2$ дисклинации в каждый октагон $\{5,6,7,8\}$ приводит к 6-вершинникам (8-2)-вершинникам и к возможности “обратного” отображения $\{5,6,7,8\}$ на сферу – в особое 96-вершинное разбиение поверхности икосидодекаэдра на 5-, 6- и 7-вершинники. Группой симметрии такого разбиения $\{5,6,7, (8-2)\}_i$ является $T_h = D_{2h}S C_3$. Икосидодекаэдр – корневой политоп системы H_3 , которую образуют 30 векторов, перпендикулярных плоскостям симметрии M в группе икосаэдра Y_h . Плоскости M_5 и M_3 , проходящие через центр икосидодекаэдра перпендикулярно его пятерным и тройным осям, не являются плоскостями M . В определенном смысле они соответствуют плоскостям симметрии 4-мерной группы $[3,3,5]$ и позволяют выразить инварианты системы H_4 через инварианты системы H_3 [27]. Уникальность $\{5,6,7, (8-2)\}_i$ определяется тем, что одной из (симметрийно–независимых по группе T_h) вершин разбиения является точка пересечения M_3 и M , где $Y_h \supset M \notin T_h$. Вторая вершина задается делением ребра икосидодекаэдра в отношении $1:\tau$ при пересечении M_5 с плоскостью m^* , которая параллельна плоскости m из T_h . (рис.5.13 a). Экваториальный пояс $\{5,6,7, (8-2)\}_i$ (вокруг экватора, образованного пересечением M_3 с ребрами икосидодекаэдра) составляет цепочка из граничащих по ребру 5 - и 7 - угольников (рис.5.13 δ). Вышеизложенное позволяет определить $\{5,6,7, (8-2)\}_i$ как результат отображения на сферу упоминаемой ранее подсистемы $H_4(24)$.

Лента $\{5,6,7,8\}$ может быть отображена и в полоску 3-мерной кубической минимальной периодической поверхности $\{5, 6, 7, (8-2)\}_{min}$, образованной закономерно чередующимися “холмами” и “впадинами”, разбитыми на 5-, 6- и 7-угольники (рис.5.13 e).

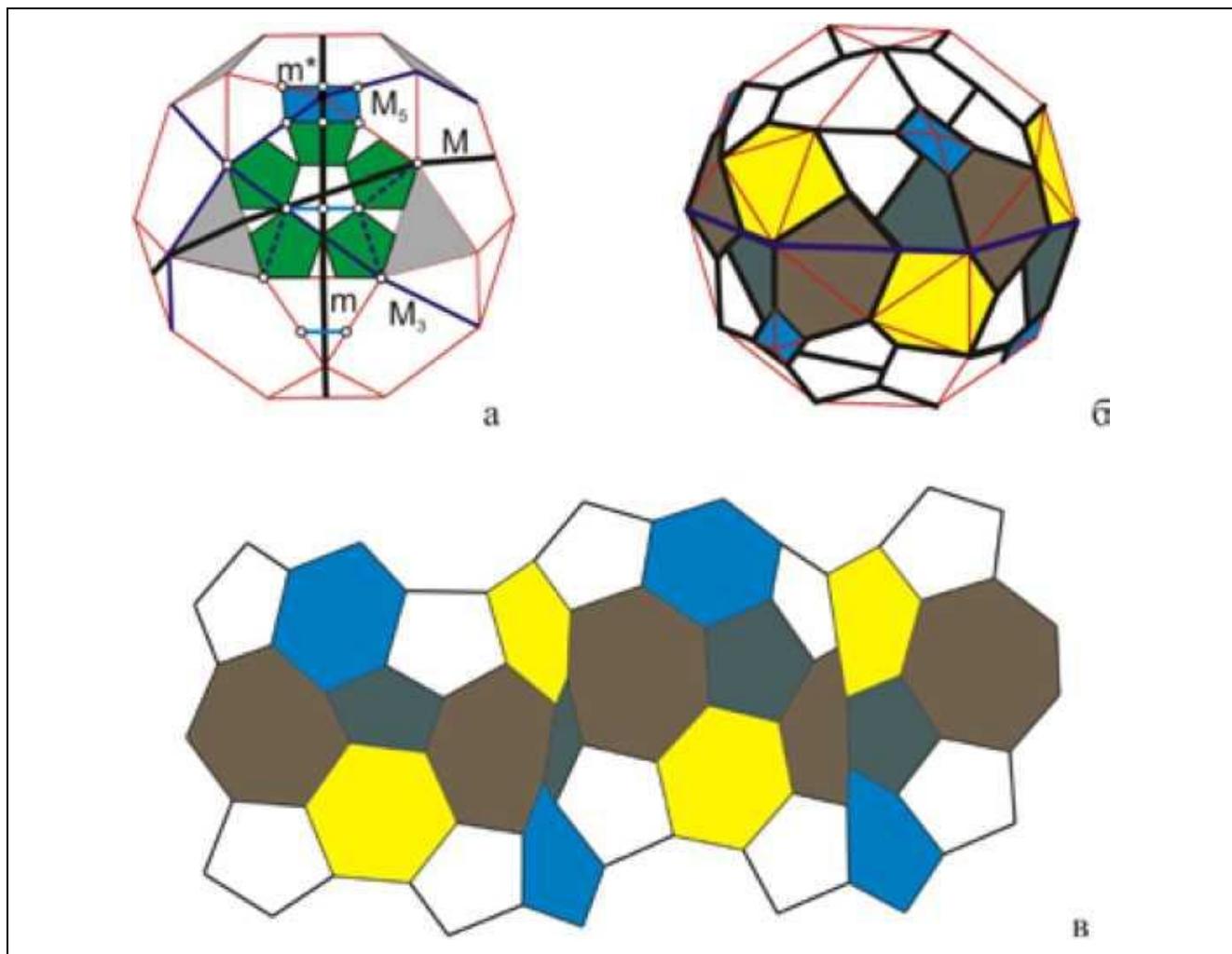


Рис.5.13. Особые разбиения двумерных поверхностей на 5-, 6- и 7-угольники.

- (а) Центры серых треугольников икосидодекаэдра образуют куб. Разбиение икосидодекаэдра (красные линии) плоскостями: m и M (черные линии), M_3 и M_5 (синие линии), m^* (голубая плоскость, секущая икосидодекаэдр). Плоскости симметрии Y_h : $m \in T_h$, $M \in Y_h$, плоскости M_3 и M_5 проходят через центр икосидодекаэдра перпендикулярно его 3-ой (5-ой) оси, но не принадлежат Y_h . Кружками отмечены пересечения плоскостей M и M_3 , m^* и M , m^* и m , которые определяют особые точки самоподобного разбиения пентагональной грани на пентагоны, показанные зеленым цветом. Кружки являются вершинами разбиения пентагональной и прилегающей к ней треугольной грани на два 5-вершинника и 7-вершинник.
- (б) Трехкоординированное разбиение икосидодекаэдра (красные линии) на 5-, 6- и 7-вершинники. «Экватор» (пересечение M_3 с икосидодекаэдром) показан синим, экваториальный пояс образует темно-зеленые и темно-коричневые 5- и 7-вершинники. Голубым и желтым показаны 6-вершинники с симметрией C_{2v} и C_{3v} .
- (в) Отображение разбиения (б) в разбиение 3-мерной минимальной периодической поверхности, состоящей из холмов и впадин. Экваториальный пояс отображается в центральную полоску из 5- и 7-вершинников.

Такая полоска может быть преобразована в геликоидальную поверхность $\{5,6,7,(8-2)\}$, также являющуюся минимальной [273], при этом экваториальный пояс $\{5,6,7,(8-2)\}_i$ отобразится в ее “центральную часть” из 5 - и 7 - угольников. Суммируя вышеизложенное, получим соотношения:

$$E_8(24) \rightarrow H_4(24) \rightarrow \{5,6,7,(8-2)\}_i \rightarrow \{5,6,7,(8-2)\}_{\min} \rightarrow \{5,6,7,(8-2)\} \subset E^3, \quad (5.19)$$

которые определяют особое разбиение $\{5,6,7, (8-2)\}$ геликоидальной поверхности.

Вторая координационная сфера E_8 содержит 240 векторов первой координационной сферы и 2160 векторов собственно второй координационной сферы, которой поэтому можно сопоставить размещение 10 первых координационных сфер по вершинам подобного $\{3,3,3,4\}$ политопа большего радиуса. При этом каждый политоп $\{3,4,3\}$ с центром в вершине $\{3,3,3,4\}$ принадлежит только одной из таких первых координационных сфер (рис.5.10). Объединение всех соответствующих P_{3-6} вершин второй координационной сферы E_8 , определяет 960-вершинный политоп $\{960\}$, образованный десятью наборами – по одному P_{3-6} из каждой первой координационной сферы (рис.5.10). Таким образом, соотношения (5.19) справедливы и для отображения политопа $\{960\}$ при условии отображения 10 его вершин в соответствующую вершину $\{5,6,7, (8-2)\}$.

Всякая вершина $\{5,6,7, (8-2)\}$ принадлежит одному из 5-циклов, которые соединены стрелками, поэтому точки на $\{5,6,7, (8-2)\}$ могут быть представлены объединением λ -окружностей [15, Т.2] двух типов: S_1^1 и S_2^1 , содержащих, соответственно, вершины пентациклов и стрелок (рис.5.12б). Такое построение соответствует минимальной сети Штейнера для плоских торов [274] и позволяет построить в E^3 универсальное накрытие вида:

$$S^3 \setminus (S_1^1 \cup S_2^1) \rightarrow S^1 \text{ (слой } (S_1^1 \cup S_2^1)), \quad (5.20)$$

где $S^3 \setminus (S_1^1 \cup S_2^1)$ - сфера S^3 с «выколотыми» окружностями $S_1^1 \cup S_2^1$. Аналогично накрытию над букетом окружности и сферы [15, Т.2], расслоению (5.20) можно сопоставить геликоид (в который развернется окружность S^1), точки которого нагружены окружностями, определяемыми слоем. Действительно, наборы окружностей $v_1 \dots v_k$ из S^3 можно рассматривать как слоение вида $S^3 \setminus (v_1 \dots v_k) \rightarrow S^1$ с базой S^1 [15, Т.2].

Для топологически регулярных точек функции Морса, представленных серединами ребер многогранников, возможен вариант слоения (5.20), при котором многоугольники из $\{5,6,7, (8-2)\}$ принадлежат окружностям и над ними возникают трубчатые поверхности. При этом отображение вершин $\{960\}$ на такие поверхности гарантирует топологическую

тетракоординированность каждой вершины, при которой длины ребер и углов существенно отличаются от идеальных. Слою в (5.20) соответствуют окружности, на которых лежат вершины $\{5,6,7, (8-2)\}$, а базе S^1 – 10 вершин, задаваемых центрами 10 первых координационных сфер, которые образуют вторую координационную сферу E_8 (рис.5.10). Таким образом, для дискретного варианта (5.20), соответствующего отображению политопа $\{960\}$ в E^3 , получим соотношение:

$$\{960\} \rightarrow \sum_{i=1}^{10} \sum_j (\{5\} \cup \{2\})_{ij} \rightarrow 10_1 \text{ (слой)} \sum_j (\{5\} \cup \{2\})_j, \quad (5.21)$$

которое позволяет каждой вершине $\{5,6,7, (8-2)\}$ однозначно сопоставить 10-вершинный геликоид 10_1 . При этом стрелке сопоставляется объединение двух таких геликоидов, образующих $<110>$ – цепочку в структуре алмаза, а 5-, 6-, 7- и $(8-2)$ -угольникам – объединения таких цепочек в конечные трубы 4-х типов.

Реализация слоения (5.21) требует использования симплектичности преобразований при переходе от рассмотрения группы Гурвица (единичных кватернионов) к матрицам 2×2 над комплексным полем, образующим группу T_1^C . Подобный переход оставляет в рассмотрении характеристические числа $p_1^2=4$, $p_2=7$ для кватернионного расслоения HP^1 . Десятимерному пространству, определяющему E_8 , соответствует проективное многообразие $[CP^4]$, в которое вкладываются подмногообразия вида $[CP^2] \times [CP^2]$ и $[CP^2]$. С учетом характеристических чисел $p_1^2=25$ и $p_2=2 \cdot 5=10$ для $[CP^4]$ и $p_1^2=2 \cdot 3^2=18$ и $p_2=3^2=9$ для $[CP^2] \times [CP^2]$, а также $p=3$ для $[CP^2]$ получаем основные характеристические числа 10, 9, 7, 3, 2, которые по алгоритму [36, 272] позволяют определить нецелочисленные оси трубок для $\{5,6,7,(8-2)\}10_1$. Такими осями являются оси $20/9$ ($40/9$ при удвоении числа точек) или $20/11$ ($60/11$ и $80/11$ при утроении и четверении точек, соответственно), а также $20/3=20/17$ ($80/17$ при четверении точек) и $20/7$ ($40/7$ или $80/14$ при соответствующем увеличении числа точек). Изменение числа точек (элементов) является процессом, соотносящимся со снятием конфигурационного вырождения для каждой точки. Тем самым задаются функции склейки для соответствующего слоения, которое приводит к локально-периодическим структурам, представляющим собой объединение геликоидов (трубчатых структур, стержней) Госсета.

Полученная по (5.21) структура состоит из конечных трубок с нецелочисленными осями $60/11$, $80/17$, $80/14$, $80/11$, которые можно аппроксимировать перпендикулярами к общей оси геликоидов, размножающих указанные трубы. Она может рассматриваться и как объединение коаксиальных цилиндров, “гофрированная” поверхность каждого из которых определяется разбиением $\{5,6,7,(8-2)\}$ и представляет собой объединение геликоидов. Локальная

периодичность такой структуры проявляется в невозможности совмещения двух “гофрированных” поверхностей аффинными преобразованиями, которые совмещают два соответствующих коаксиальных цилиндра. В конечном итоге, данное построение определяет некристаллическость определенной таким образом структуры, модель которой приведена на рис.5.9. Данная упорядоченная некристаллическая алмазоподобная структура была подробно рассмотрена в работах [33, 36]; 5-, 6-, 7- и (8-2)-угольникам – сопоставлены объединения цепочек в конечные трубы 4-х типов; а всей поверхности $\{5,6,7,(8-2)\}$ – упорядоченная некристаллическая алмазоподобная структура $\{(5,6,7,(8-2))\}10_1$.

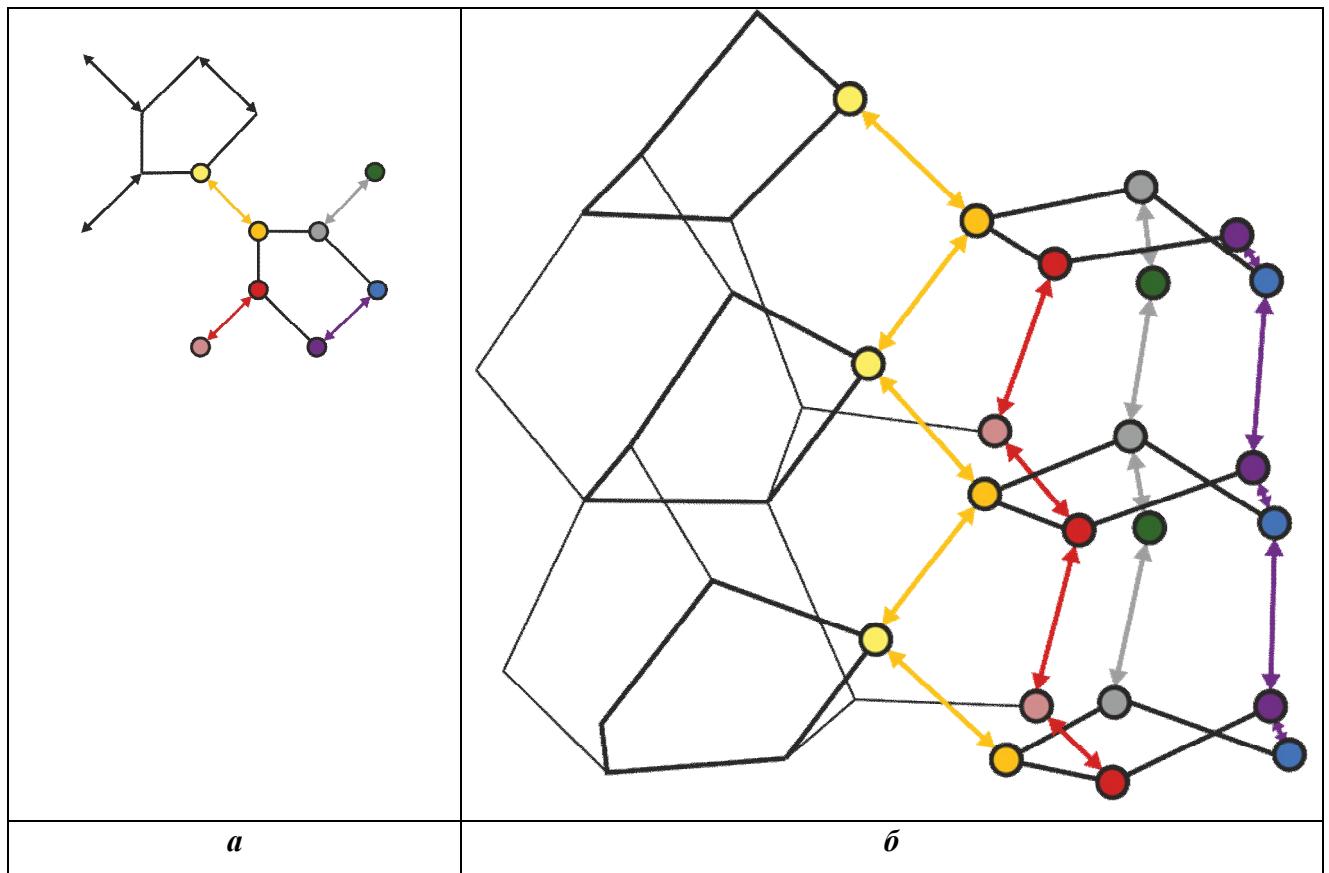


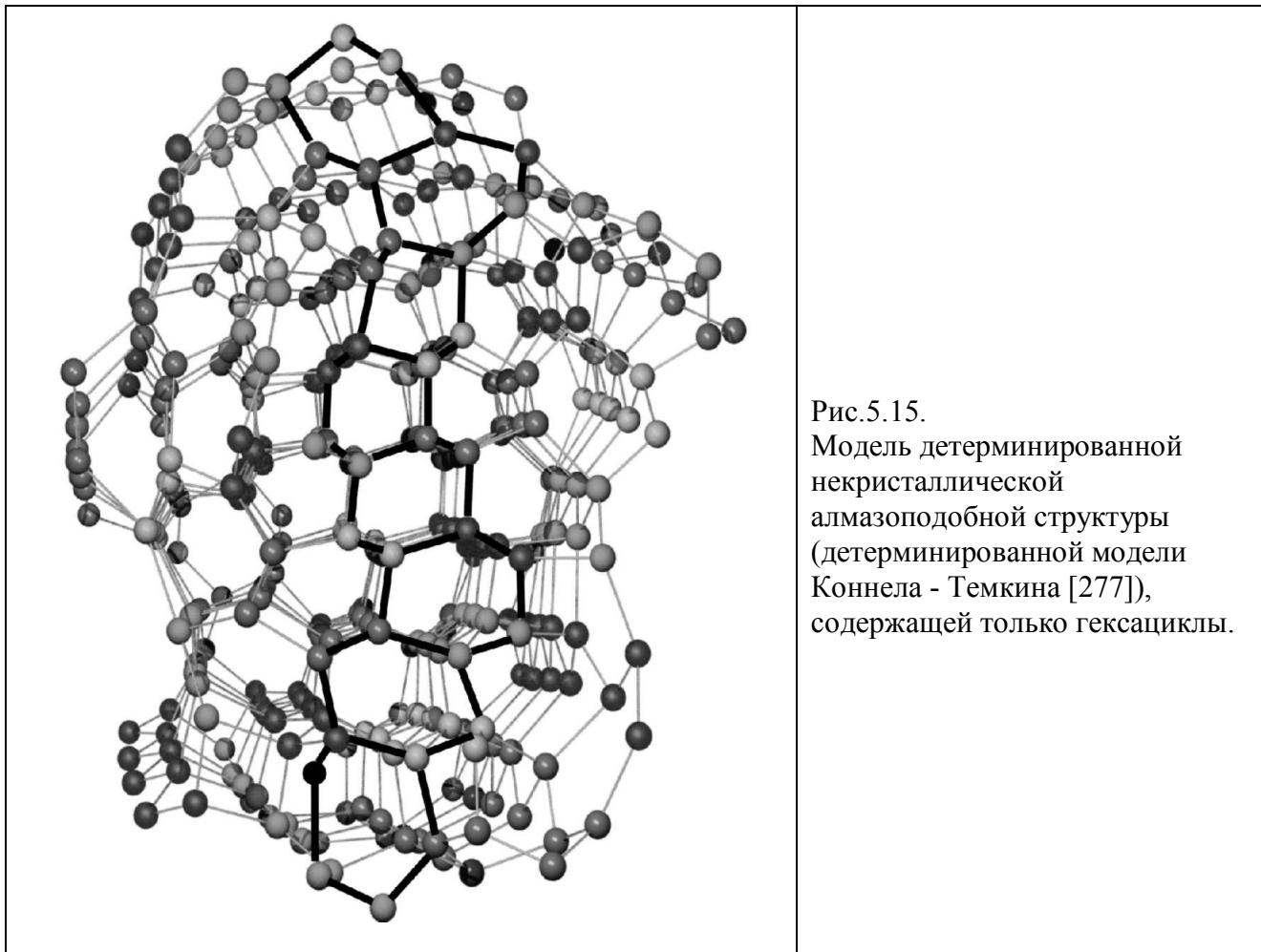
Рис. 5.14. Отображение полигонополиполитопа $\{960\}$ на трубчатые поверхности в E^3 .

(а) Фрагмент разбиения, изображенного на рис.5.13 α , вершинам которого сопоставляются спирали 10/1. Пара вершин, связанных стрелкой, показана темным и светлым оттенком одного цвета; ей соответствует пара спиралей, образующих 20-вершинную цепочку, подобную $<110>$ – цепочке в алмазе. Вершины разбиения и соответствующие им вершины спиралей показаны одним цветом, ребра $<110>$ -цепочек – стрелками.

(б) Гофрирование цилиндров $<110>$ -цепочками из (а). Светло- и темно-желтые спирали 10/1 располагаются на поверхности цилиндров и образуют одну $<110>$ -цепочку.

5.6. ДНАС и Модели Коннела–Темкина, Полка для аморфного кремния

Политоп {240} содержит 14-вершинный ПК_{30/11} политопа {240}, который элементарно подобен ПК_A и содержит лишь гексациклиques типа твист–ванна. Из ПК_A и ПК_{30/11}, содержащих лишь гексациклиques, по алгоритму, определяемому (в конечном счете) соотношениями (5.21), может быть собрана вся детерминированная некристаллическая алмазоподобная структура (ДНАС), которую можно рассматривать как детерминированную модель Полка [276]. В промежутках между ПК_A и ПК_{30/11} возникают каналы с поперечными пента- и гептацикликами (рис.5.9). Аналогично ДНАС (рис.5.9) может быть построена ДНАС (рис.5.15), содержащая только гексациклиques, которую можно рассматривать как детерминированную модель Коннела - Темкина [277].



В ДНАС каждый ПК 30/11 окружен тремя ПК D_2^{+dc} и тремя ПК $30/11^{-dc}$, составляющими его первую корону. ПК D_2 возникает как центральная пустота в цикле из

четырех таких первых корон, и его первую корону образуют четыре ПК D_2^{+dc} и четыре ПК $30/11^{-dc}$. При этом каждый атом в ДНАС принадлежит либо ПК 30/11 или ПК D_2 (точнее, ПК D_2^R); что позволяет считать реалистичной возможность сборки данной ДНАС из углеродных остатов молекул диамантана и дитвистана, совпадающих с ПК D_2 и ПК 30/11. Данная ДНАС состоит из пента-, гекса- и гептациклических (рис.5.9 a), что позволяет рассматривать ее как максимально детерминированную модель Полка [276]. Для моделей детерминированной некристаллической алмазоподобной структуры из 340 атомов, изображенных на рис.5.9 и рис.5.15, построены функции радиального распределения (рис.5.16).



Структура ДНАС позволяет предположить и возможность получения на ее основе нанокомпозитного алмазоподобного материала с уникальными характеристиками, описание зонной структуры которого может быть сведено только к описанию ее "линейной" части [36].

5.7. Заключение

Основным "структурным" результатом главы является априорное построение упорядоченной некристаллической структуры, определяемой второй координационной сферой решетки E_8 . Алгоритм построения сводится к следующим основным шагам.

1. При сохранении топологических и алгебраических ограничений проводится отображение особой 96-векторной подсистемы E_8 в 48-вершинное разбиение поверхности

куба. Развертка такого куба вкладывается в ленту плоской мозаики $\{4,4\}$ – орбиту плоскости скользящего отражения.

2. Каждая вершина ленты (с учетом необходимости снятия вырождения вида $96/48=2$ и сохранения определенной симметрии) рассматривается как соответствующая середине стрелки, ориентированной определенным образом. Соединение концов таких стрелок задает трехкоординированное разбиение ленты на 5,6,7 и 8-угольники, введение в которые $+\pi/2$ дисклинаций преобразует их в 6-угольники (8-2), не принадлежащие плоскости. Вся лента при этом отображается в особое 96-вершинное разбиение икосидодекаэдра $\{5,6,7,(8-2)\}_i$ и в полоску бесконечной 3-мерной минимальной периодической поверхности $\{5,6,7,(8-2)\}_{min}$, которая трансформируется в геликоидальную поверхность $\{5,6,7,(8-2)\}$.

3. Отображение в $\{5,6,7,(8-2)\}_i$ заданной подсистемы из второй координационной сферы E_8 позволяет каждой вершине $\{5,6,7,(8-2)\}$ однозначно сопоставить 10-вершинный геликоид 10_1 . Стрелке сопоставляется объединение двух таких геликоидов, образующих $<110>$ – цепочку в структуре алмаза, 5-, 6-, 7- и (8-2)-угольникам – объединения таких цепочек в трубки, а всей поверхности $\{5,6,7,(8-2)\}$ – упорядоченная некристаллическая алмазоподобная структура $\{5,6,7,(8-2)\}10_1$. Полученная структура состоит из расположенных по геликоидам с общей осью конечных трубок с нецелочисленными осями $60/11$, $80/17$, $80/14$ и $80/11$ (близкими к перпендикулярам к общей оси). Она может рассматриваться как объединение коаксиальных “гофрированных” цилиндрических поверхностей, каждая из которых разбивается на определяемые $\{5,6,7,(8-2)\}$ геликоидальные поверхности.

Результаты настоящей главы позволяют сделать следующие выводы:

1. Отображение линейных подструктур алмазоподобного политопа $\{240\}$ в E^3 определяет стержни из ПКА или спирали из ПКУ. При определении слоя как 20-вершинной цепи, подобной $<110>$ – цепочке алмаза, базой расслоения Хопфа для $12 \cdot 20 = 240$ -вершинного политопа $\{240\}$ является кубооктаэдр, в каждой из 12 вершин которого сходятся 2 треугольника и 2 квадрата. Отображение стержня из ПКА на плоскость дает “декорированный полигон”: либо правильный треугольник, либо ромб (2 правильных треугольника с общим ребром), либо трапецию (3 правильных треугольника с 2 общими ребрами и общей вершиной). Вершины “декорированных полигонов” могут быть 2-х типов (условно, либо зачерненные, либо пустые). Объединению стержней из ПКА в упорядоченную алмазоподобную структуру соответствуетстыковка таких декорированных полигонов по правилу: каждая вершина принадлежит 4-м полигонам, типы углов при каждой вершине чередуются (пустой, зачерненный, пустой, зачерненный).

2. Каждый из декорированных полигонов вкладывается в правильный шестиугольник, поэтомустыковка декорированных полигонов приводит к регулярному разбиению плоскости на правильные треугольники, сходящиеся по 6 у каждой вершины. Из 6 углов при каждой вершине от 2-х до 4-х должны быть зачернены. Каждое такое разбиение отображается на себя одной из групп цветной симметрии, изоморфной группе Р6тт плоской гексагональной решетки. Все идеальные прототипы упорядоченных некристаллических алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, других линейных дефектов в алмазе, алмазоподобных пленок) могут быть получены определением всех групп цветной симметрии, отображающих симметрию разбиения плоскости на декорированные полигоны.

3. Вторая координационная сфера решетки E_8 позволяет определять алмазоподобные политопы, число вершин в которых кратно 240. Учетверение каждой вершины кубооктаэдра - базы в расслоении Хопфа для политопа {240}, приводит к 48-вершинному разбиению поверхности усеченного куба на «квадраты» и треугольники, которое определяет $48 \cdot 20 = 960$ -вершинный алмазоподобный политоп {960}. Развертка такого куба вкладывается в ленту из декорированных полигонов; сопоставление каждому полигону этой ленты стержня из ПКА приводит к суперспирали из стержней, генерируемых ПКА, с боковыми гексациклами и поперечными пента-, гекса- и гептациклами.

4. Суперспираль из стержней, генерируемых ПКА, представляет собой детерминированную некристаллическую алмазоподобную структуру (ДНАС), образованную изолированными друг от друга скрученными алмазными каналами и каналами 30/11 из политопа {240}. В промежутках между этими каналами находятся каналы с «поперечными» пента- и гептациклами.

5. Отображение алмазоподобных политопов в полигоны со стрелками на ребрах позволяет решать более общие задачи, чем при их отображении в декорированные полигоны.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [33, 35, 72, 77, 78].

Глава 6. Трехуровневая (полиэдры-полости, стержни, объединения стержней) модель строения тетракоординированной структуры газогидратов и симметрийно возможные фазовые переходы

6.1. Введение. Газогидраты, особенности их строения

Газовые гидраты относятся к клатратным соединениям и представляют собой молекулы газов, заключённые в тетракоординированный водный каркас. Несмотря на весьма продолжительную историю газогидратов, определенная доля экзотичности сохраняется за ними и в настоящее время. В 1973 г. Жан-Мари Лен ввел для описания подобных соединений термин “надмолекулярная” (супрамолекулярная) химия [278], который подчеркивал значение геометрического фактора для существования таких структур.

Повышенное внимание к газогидратам определяется, в первую очередь, гигантскими запасами углеводородного сырья (в основном метана), находящегося в газогидратной форме. Внешне газогидраты напоминают мокрый спрессованный снег, переходящий в лед, но могут выглядеть и как кристаллы. При современном уровне потребления энергии (даже если будет использовано только 10% природных ресурсов газогидратов) мир будет обеспечен сырьем на 200 лет. По последней оценке ВНИИГаза, на 30% территории России существуют условия для накопления гидратов природного газа, причем их запасы на континентальной и шельфовой части оценивают в 100-1000 трлн. м³ (рис.6.1). Технологии добычи топлива из газогидратов связаны с рядом трудностей, в частности, со способом безопасного и эффективного высвобождения газа из гидрата. Газогидраты легко трансформируются, достаточно понизить давление в пласте или повысить температуру выше равновесной. На практике (при разработке Мессояхского месторождения, расположенного на северо-востоке Западной Сибири) сегодня реализован только один способ – понижения пластового давления ниже равновесного [279].

Из-за образования пробок, которые закупоривают трубы нефте- и газопроводов, изучение свойств кратратных гидратов необходимо при разработках современных технологий транспортировки газа из газогидратных месторождений. Известно, что рост кристаллов газогидратов разделяет трубу на две части с разным давлением, и при повышении давления в первой части может произойти взрыв. Пробка также может вести

себя как снаряд, разрушающий трубу, при сильном увеличении разницы давления между двумя областями. Газогидраты вынудили специалистов British Petroleum отказаться от применения особого защитного купола для ликвидации утечки нефти в Мексиканском заливе. Работы были остановлены после того, как на внутренней поверхности 100-тонного купола образовались газовые гидраты, придавшие конструкции нежелательную плавучесть в момент спуска купола на дно [279].

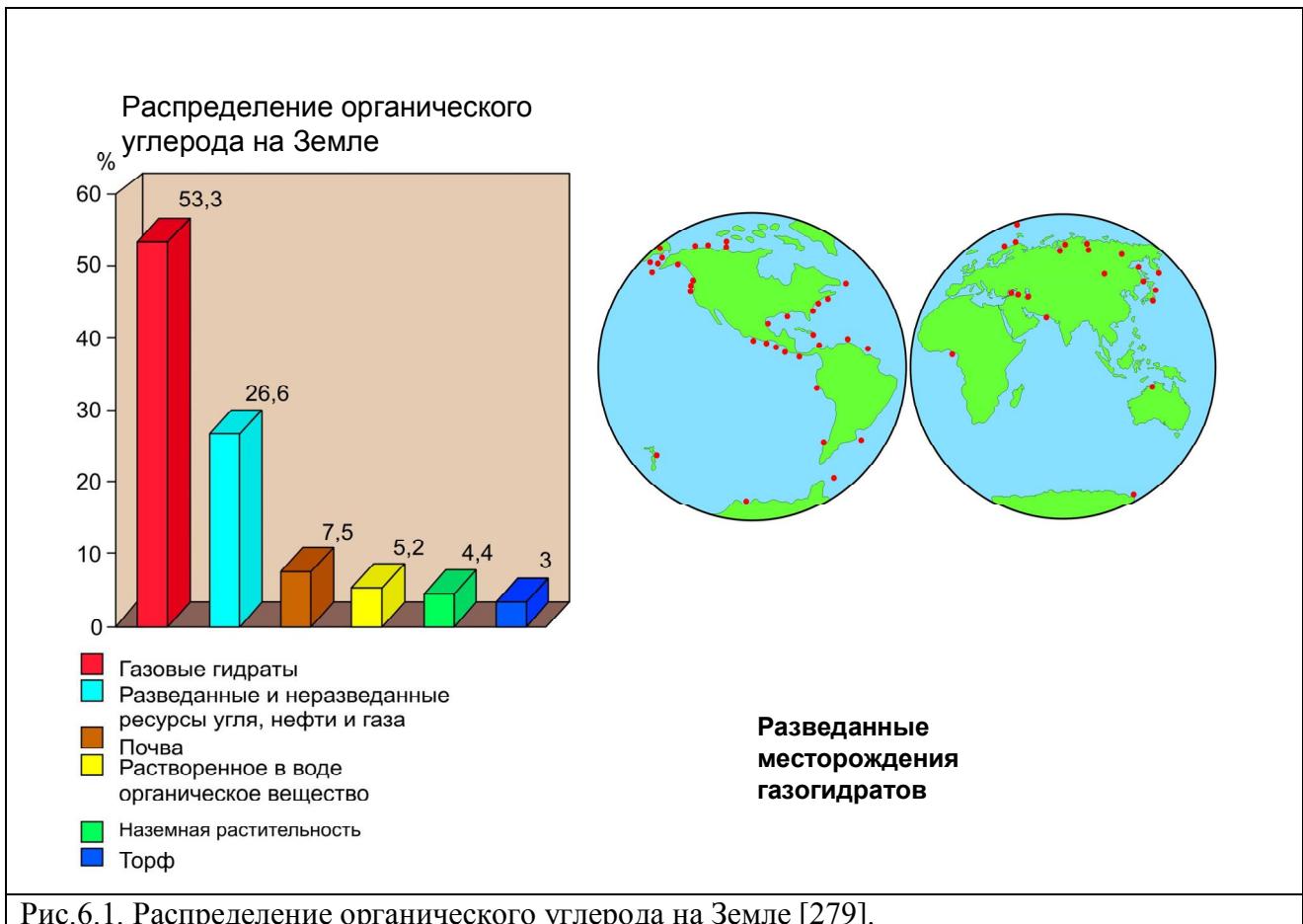


Рис.6.1. Распределение органического углерода на Земле [279].

Для водородной энергетики, способной принципиально изменить технологические основы современного общества, особое значение могут иметь технологии хранения и транспорта водорода в газогидратной форме. Изучение свойств клатратных гидратов представляет интерес и для создания энергосберегающих технологий, технологий разделения газовых смесей и т.п. Газогидраты крайне чувствительны к параметрам среды, поэтому продолжающееся глобальное потепление может привести к их разложению с выделением массы метана, способной вызвать лавинообразный

парниковый эффект. Наибольшую опасность представляют газогидраты в зонах вечной мерзлоты, которые уже сейчас находятся в неустойчивом состоянии [279]. Число публикаций, посвященных газогидратам, постоянно возрастает, но, как свидетельствует статья [280], понимание особенностей их структуры, механизмов образования и фазовых превращений остается весьма неполным (рис.6.2).

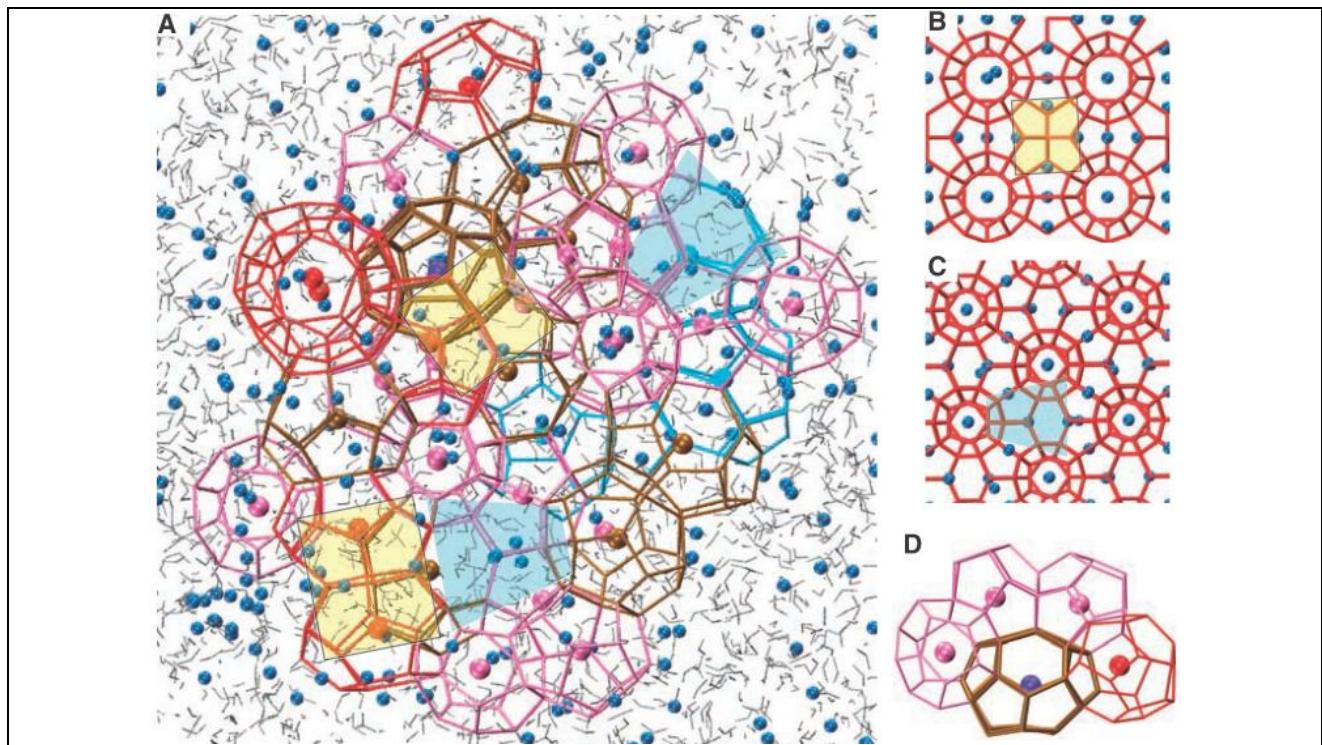


Рис.6.2. [280].

- (А) Компьютерная модель системы вода-метан через 2 мс после того, как большая часть системы превратилась в гидрат.
- (В и С) Желтые квадраты и синие трапеции выделены для сравнения с областями идеальных кристаллогидратов КI (В) и КII (С). Полиэдры-полости, составляющие мотивы КI и КII, имеют цветовую кодировку, чтобы еще больше подчеркнуть существование КI и КII: красный цвет для тетракадекаэдров $5^{12},6^2$; светло-синий для гексакадекаэдров $5^{12},6^4$; коричневый для пентакадекаэдров $5^{12},6^3$; розовый для додекаэдров 5^{12} .
- (Д) Образование газогидрата с помощью пентакадекаэдра $5^{12},6^3$, образующегося вокруг метана (фиолетовый). Две грани додекаэдров расположены напротив друг друга; гексагональная грань пентакадекаэдра расположена горизонтально.

Ось пятого порядка додекаэдра – основного полиэдра-полости газогидратов несовместима с решеткой кристалла, поэтому симметрия даже кристаллического газогидрата не может быть адекватно отображена в рамках классической кристаллографии. Винтовые

оси $10/3$, $12/5$ в стержнях газогидратов также несовместимы с трансляционной решеткой кристалла (рис.6.3).

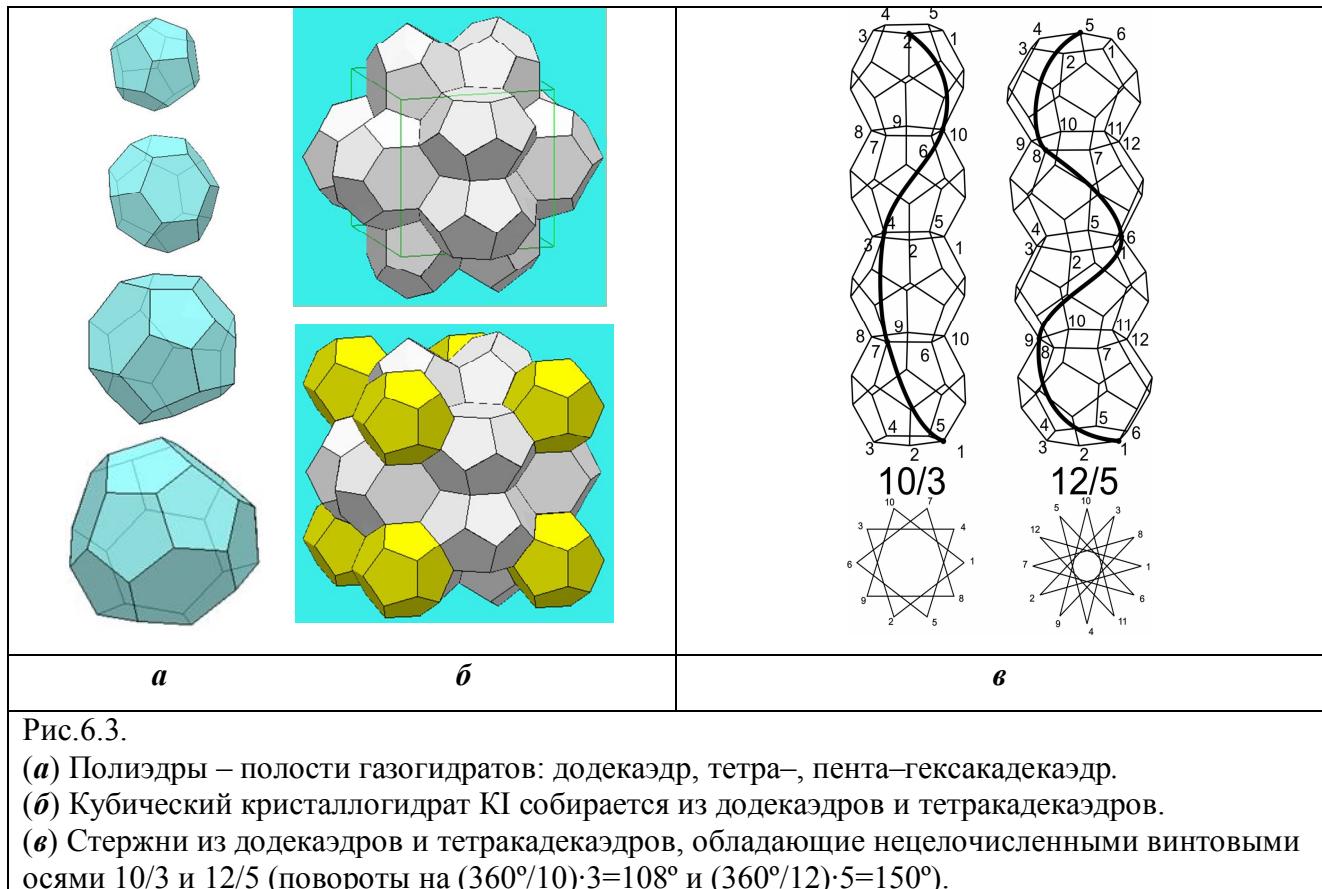


Рис.6.3.

- (а) Полиэдры – полости газогидратов: додекаэдр, тетра-, пента–гексакадекаэдр.
- (б) Кубический кристаллогидрат KI собирается из додекаэдров и тетракадекаэдров.
- (в) Стержни из додекаэдров и тетракадекаэдров, обладающие нецелочисленными винтовыми осями $10/3$ и $12/5$ (повороты на $(360^\circ/10)\cdot 3=108^\circ$ и $(360^\circ/12)\cdot 5=150^\circ$).

Более общим, чем традиционно-кристаллографический, является комбинаторно-топологический подход, позволяющий осуществить вывод кристаллографических тетракоординированных 3-мерных сеток [281]. Однако даже при существующих вычислительных мощностях этот подход является весьма трудоемким, а число возможных сеток стремительно увеличивается по мере усложнения комбинаторики, составляющих их полиэдров [281]. Кроме того, даже вывод всех бесконечных кристаллографических сеток еще не решает, например, задачу вывода всех симметрийно-возможных фазовых превращений, которые могут определяться конечными в атомном масштабе (хотя бы в одном измерении) подструктурами газогидрата.

Федоровские группы в общем случае не способны отобразить кооперативную переброску связей. Федоровская группа (группа жестких дискретных преобразований E^3) не отображает симметрии полостей газогидрата и их объединений. Таким образом, для отображения симметрии газогидратов необходим более общий, чем федоровские группы, аппарат.

6.2. Полиэдры – полости газогидратов и конструкции алгебраической геометрии

Если наиболее симметричные полиэдры–полости газогидратов D, T, P, H (додекаэдр, тетра-, пента-, гексакадекаэдр) определяются как дуальные к полиэдрам Z12, Z14, Z15, Z16 (икосаэдру и Франк–Касперовским полиэдрам) [9, 176], то менее симметричные полиэдры–полости, например, D' и E, подобным образом [282] не определялись.

Невозможное в E^3 разбиение на правильные тетраэдры реализуется в политопе {3,3,5}. Политоп {3,3,5} и дуальный к нему политоп {5,3,3} отображаются на себя группой $Y'xY'$ порядка 14400. Если Y –группа вращений икосаэдра из 60 элементов $g(n, \varphi)$, где n – единичный вектор оси икосаэдра, вокруг которой происходит вращение на угол φ , то Y' – группа из 120 элементов вида $y(n, \varphi)$ и $y(n, \varphi+2\pi) = -y(n, \varphi)$, которые однозначно соответствуют $\pm\varphi$ –дисклинациям вводимым в икосаэдр вдоль оси n . Например, элемент $y(n, -2\pi/5)$ соответствует $-2\pi/5$ –дисклинации, превращающей (при вставке клина с углом $2\pi/5$) пентагональную «шапочку» икосаэдра в гексагональную (рис.6.4); взаимодействие дисклинаций определяется произведением соответствующих им элементов группы Y' . Введение в икосаэдр вдоль пятерных осей двух-, трех- и четырех $-2\pi/5$ -дисклинаций приводит к образованию полиэдров Франка-Каспера Z14 (рис.6.4), Z15, Z16 [9].

Введение в вершины «ромба» из двух соседних треугольных граней икосаэдра дисклинического квадруплета q (из двух $-2\pi/5$ и двух $2\pi/5$ -дисклинаций) приводит к переброске диагонали в этом «ромбе». Квадруплету q или 2π -дисклинации [7] соответствует элемент $y(n, 2\pi) = -1$ группы Y' и вращение на 2π по ленте Мебиуса. Таким образом, если в икосаэдр ввести три 2π -дисклинации (сохраняющих подгруппу C_3 его группы Y_h) и потребовать максимальной точечной симметрии, то возникает 12-вершинник $Z12^{3q}/D_{3h} = [4^3, 5^6, 6^3]$, с группой симметрии D_{3h} и 20 треугольными гранями. При этом у трех вершин $Z12^{3q}/D_{3h}$ будут сходиться по 4 ребра, у шести – по 5 и у трех по 6, а дуальному к нему будет полиэдр-полость D' (рис.6.5). Вдоль каждой из трех прямых, попарно соединяющих вершины верхней и нижней гексагональных «шапочек» в $Z14 = Z12^{2d}/D_{6d} = [5^{12}, 6^2]$, можно ввести по две $-2\pi/5$ -дисклинации и 2π -дисклинациями «перебросить» диагонали в трех «прямоугольниках» (из половинок треугольных граней). При этом возникает 20-вершинный полиэдр $Z14^{6d, 3q}/D_{6h} = (Z12^{2d})^{6d, 3q}/D_{6h} = [5^{12}, 6^8]$, дуальным к которому является полиэдр-полость E (рис.6.5).

<p>Рис.6.4. Икосаэдр Z12, полиэдр Франка–Каспера Z14 и дуальные им додекаэдр D и тетракадекаэдр T. При введении в Z12 вдоль оси C₅ двух $-2\pi/5$–дисклинаций возникают 2 “дополнительные” вершины и 6 ребер, показанные в Z14 двойными линиями. Вершины, в которых сходятся 6 ребер, показаны черными кружками.</p>	<p>Рис.6.5. Графы полиэдров Z12^{3q}/D_{3h}, Z14^{6d,3q}/D_{6h} и дуальные им полиэдры–полости D' и E. Вершины, в которых сходятся 6 (4) ребер, показаны черными кружками (белыми квадратами). 2π–дисклинация определена в центре «параллелограмма», в котором она отбрасывает и вводит ребра, показанные пунктиром и двойной линией. Часть задних линий в Z14^{6d,3q}/D_{6h} не показана, черные вершины в его «экваториальном поясе» возникают при введении $-2\pi/5$–дисклинаций в Z14.</p>

Символы полиэдров $Z12^{3q}/D_{3h} = [4^3, 5^6, 6^3]$ и $(Z12^{2d})^{6d,3q}/D_{6h} = [5^{12}, 6^8]$ фактически задают дисклинации и соответствующие им элементы группы Y' , которые определяют вывод этих полиэдров из икосаэдра. Симметрия дуального полиэдра такая же, как у исходного, поэтому все полиэдры-полости D', T, P, H, E могут быть получены из додекаэдра D (с группой симметрии Y_h) посредством $-2\pi/5$ и 2π -дисклинаций, взаимодействие которых определяется произведениями соответствующих им элементов Y' :

$$Y_h \subset Y' \times Y' \subset SU(2) \times SU(2), \quad (6.1)$$

где Y' – подгруппа специальной унитарной группы $SU(2)$ [15].

6.2.1. Трансформация додекаэдра в кластер алмазоподобной структуры

При прочих равных условиях «энергетически-выгодной» можно считать трансформацию кластера, сохраняющую инвариантным максимальный подграф, который содержит все его вершины. Определение симметрийных основ структурного механизма входа молекулы-гостя в полость (и выхода из нее), требует прежде всего рассмотрения трансформации додекаэдра в 20-вершинный тетракоординированный кластер (с ребрами той же длины), внутри которого нет места для молекулы-гостя.

Додекаэдр – это карта $\{5,3\}$ на сфере (в каждой вершине сходятся 3 пентагона), его многоугольником Петри является декацикл – последовательность ребер, в которой каждые 2, но не 3 ребра принадлежат одной грани [24]. Шесть таких декациклов, содержащих все 30 ребер и 20 вершин додекаэдра, изоморфны карте $\{10,3\}_5$ (в каждой вершине сходятся 3 декацикла; вершины, отстоящие друг от друга на 5 ребер из многоугольника Петри, отождествляются) на неориентируемой поверхности [22, 147]. Карта $\{10,3\}_5$ содержит и пентацикли, являющиеся ее минимальными циклами (Рис.6.6a).

Карта $\{10,3\}_5$ алломорфна карте $\{10,3\}'_5$ (рис.6.6б), отличающейся от нее лишь тем, что ее минимальными циклами являются гексацикли [147]; переход от $\{10,3\}_5$ к $\{10,3\}'_5$ (и обратно) осуществляется 2π -дисклинациями. Так, например, если в декацикле $13'65'21'36'74'$ (цифры со штрихами нумеруют «черные» вершины) разделенном на 4 пентацикла, ребро $8'10$ заменить ребром $5'7$, то помимо 4 пентациклов (двух старых и двух новых) декацикл разбивается на 2 гексацикла: $13'65'74'$ и $76'31'25'$ (рис.6.6а). Карта $\{10,3\}'_5$ вкладывается в граф $\{10\} + \{10/3\}$, который (при раскраске вершин в два цвета и соединении ребрами лишь вершин разных цветов) совпадает с бихроматическим графом $\Gamma(10_3)$ – графом инцидентности конфигурации Дезарга 10_3 (рис.6.6б). Таким образом, оказывается возможным вложение подграфа додекаэдра $\{5,3\}$ в граф инцидентности основополагающей конструкции проективной геометрии [21]:

$$\begin{array}{ccc} \Gamma(10_3) & \supset & \{10,3\}'_5 \cap \{10,3\}_5 \subset \{5,3\} \\ \downarrow & & \downarrow \\ \{10,3\}'_5 & \xleftarrow{\text{al}} & \{10,3\}_5, \end{array} \quad (6.2)$$

где $\leftarrow \text{al} \rightarrow$ – символ алломорфизма, подграф $\{10,3\}'_5 \cap \{10,3\}_5 = \{d\}$ содержит декацикли, но не содержит пента- и гексацикли.

Граф $\Gamma(10_3)$ задается своей таблицей инцидентности ($\text{ТИ}10_3$), в которой строка соответствует черной вершине, столбец – белой, а знак инцидентности в клетке i,j – ребру между i -ой черной и j -ой белой вершинами. Подтаблица $\text{ТИ}10_3$ из 24 заполненных кружков

определяет 20 вершинный кластер алмаза $\{10_3\}^6$, обмен в ней местами троек двойных кружков приводит к подтаблице ТИ $\{d\}$ кластера алмаза с графом $\{d\}=\{10_3\}^6_d$, в котором связи 56', 67' и 75' разорваны, а 89', 9,10' и 10,8' – установлены (рис.6.6б). При раскраске вершин додекаэдра в 2 цвета его граф задается ТИ $\{5,3\}$, отбрасывание из которой 6 стрелок (соответствующих ребрам между вершинами одного цвета) также приводит к ТИ $\{d\}$, определяющей подграф додекаэдра $\{d\}=\{5,3\}^6$ (рис.6.6а). Взаимные трансформации тетракоординированных кластеров $\{5,3\}^6$ и $\{10_3\}^6$ осуществляются по алломорфизму (6.2), посредством введения трех 2π -дисклиниаций, которые сохраняют симметрию D_3 этих кластеров и меняют 3 ребра графа $\{5,3\}^6$ ($\{10_3\}^6$) на 3 ребра графа $\{10_3\}^6$ ($\{5,3\}^6$).

Это определяет возможность взаимных трансформаций кластеров при давлении (с вращением), вдоль тройной оси, прикладываемом лишь к двум вершинам на этой оси (рис.6.6) и вызывающим синхронные винтовые движения всех вершин, которые реализуются посредством шарнирного прокручивания ребер.

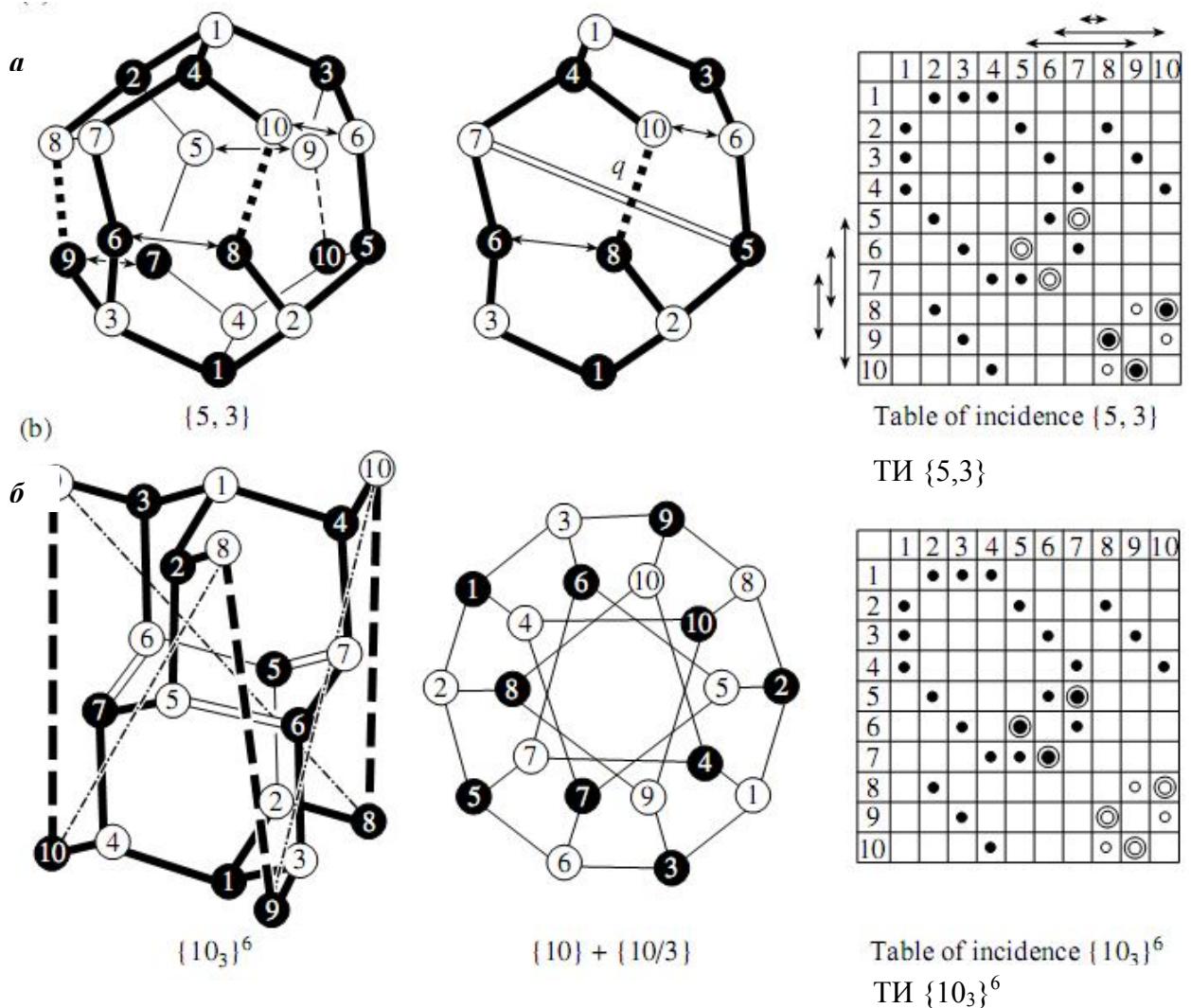


Рис.6.6. Таблицы инцидентности $\{10_3\}^6$ и $\{5,3\}$, определяющие 20-вершинный кластер структуры алмаза и додекаэдр. Показанные зачерненными и пустыми кружками знаки инцидентности соответствуют ребрам и гипотетическим связям (пунктир и штрихпунктир в кластере алмаза) в 20-вершинниках. При трансформации в додекаэдр “неалмазные” связи (пунктир) в кластере алмаза реализуются как показанные пунктиром ребра в додекаэдре. “Расширяющие” таблицу $\{10_3\}^6$ стрелки, соответствуют (показанным стрелками) ребрам додекаэдра, которые делят каждый из 6 бихроматических октациклов на 2 пентацикла.

- (a) В “бихроматическом” графе $\{5,3\}$ додекаэдра 6 стрелок соединяют вершины одного цвета; переброска ребер 2π -дисклинацией q приводит к появлению в декацикле гексацикла. ТИ графа $\{5,3\}$ совпадает с ТИ конфигурации Дезарга 10_3 при отбрасывании 6 стрелок.
- (б) 20-вершинный кластер алмаза, бихроматический граф которого вкладывается в бихроматический граф $\{10\} + \{10/3\}$, задаваемый ТИ конфигурации Дезарга 10_3 . “Неалмазные” связи показаны пунктиром и штрих-пунктиром. Ребрам кластеров соответствуют в ТИ зачерненные кружки, а связям, которые не являются ребрами – пустые. ТИ (a), (б) отличаются лишь стрелками и парами троек двойных кружков.

Итак, если разрыв в додекаэдрическом водном каркасе газогидрата 9 связей (стрелки и пунктир на рис.6.6a) позволяет молекуле–гостю покинуть полость, то оставшийся каркас «раскручивается» в кластер алмазоподобного льда до установления 3 новых связей такой же длины (двойные линии на рис.6.6б). И наоборот, если в 20-вершинном кластере алмазоподобного льда разорвать 3 связи (двойные линии на рис.6.6б), то при «скручивании» оставшегося каркаса до равенства неалмазных связей алмазным (пунктир на рис.6.6a), в образовавшуюся полость уже сможет поместиться молекула–гость.

6.2.2. Специальные конфигурации Дезарга и равнореберные 20-вершинники тетракоординированных структур

Додекаэдр – это реализация в E^3 20-вершинного регулярного разбиения сферы 30 ребрами, сходящимися по 3 в каждой вершине. Такое разбиение представляет собой карту, обозначаемую символом Шлефли $\{5,3\}$, который определяет схождение в каждой вершине 3-х пентациклов [24]. Помимо $\{5,3\}$ на сфере невозможно 20-вершинное регулярное разбиение, но оно возможно на торе, в виде карты $\{4,4\}_{4,2}$, которая разбивает тор на 20 тетрациклов 40 ребрами (рис.6.7a). Тетракоординированность совместима с икосаэдрическим окружением ряда вершин лишь при распространении структуры вдоль оси 3 (или 2) порядка в икосаэдре [177]. Додекаэдр (обладающий одинаковой с икосаэдром группой симметрии) должен трансформироваться в высокосимметричный кластер тетракоординированной структуры, поэтому ограничимся выбором такой ручки в $\{4,4\}_{4,2}$, которая (при отбрасывании) обеспечит тригональную симметрию нерегулярного разбиения сферы. Полученное разбиение будет определять 20-вершинную нерегулярную карту с $36 = 40 - 4$ ребрами и $18 = 20 - 2$ тетрациклами, обозначаемую символом $\{4,4\}^4_{4,2}$, в котором верхний индекс указывает на число отбрасываемых из регулярной карты ребер. Как объединение тетрациклов, $\{4,4\}^4_{4,2}$ можно представить в виде бихроматической карты, в которой каждая из 10 "белых" вершин связана только с "черными" и наоборот (рис.6.7a). В $\{5,3\}$ в каждой вершине сходится по 3 ребра, поэтому для переброски (или отбрасывания) минимально-возможного числа ребер при трансформации додекаэдра в равнореберный тригональный 20-вершинник, в карте $\{4,4\}^4_{4,2}$ необходимо выделить подграф с числом ребер у вершины не превышающим 3. Для этого 18 тетрациклов попарно объединяются в 9 гексациклов, в каждом из которых отбрасывается общее для двух тетрациклов ребро. Полученную таким образом нерегулярную карту обозначим $\{4,4\}^{13}_{4,2}$.

Таблица, задающая карту $\{4,4\}^{13}_{4,2}$, отличается от таблицы специальной конфигурации Дезарга $\{10_3^3\}$ [21] лишь отсутствием 6 знаков инцидентности (рис.6.7б). Иными словами, граф разбиения сферы $\{4,4\}^{13}_{4,2}$ совпадает с графиком инцидентности подконфигурации $\{10_3^3\}^6$ специальной конфигурации Дезарга $\{10_3^3\}$. Равнореберной реализацией в E^3 графа $\{10_3^3\}^6$ является 20-вершинный полиэдр с неплоскими гексагональными "гранями", который может принадлежать и газогидрату, и алмазоподобной структуре (рис.6.7б). Добавка одного знака в таблицу инцидентности $\{10_3^3\}$ определяет $\{10_3^4\}$ – максимальное расширение конфигурации Дезарга $\{10_3\}$ [21]. Соответственно график инцидентности конфигурации $\{10_3^4\}^6$ (рис.6.8а) отличается от $\{10_3^3\}^6$ (рис.6.7б) только "внутренним" ребром, соединяющим вершины, лежащие на тройной оси. Равнореберная

реализация графа $\{10_3^4\}^6$ (рис.6.8 a) представляет собой "выпрямленную" в E^3 часть политопа {240} – алмазной структуры в E^4 , все вершины которой принадлежат 3-мерной сфере S^3 [6].

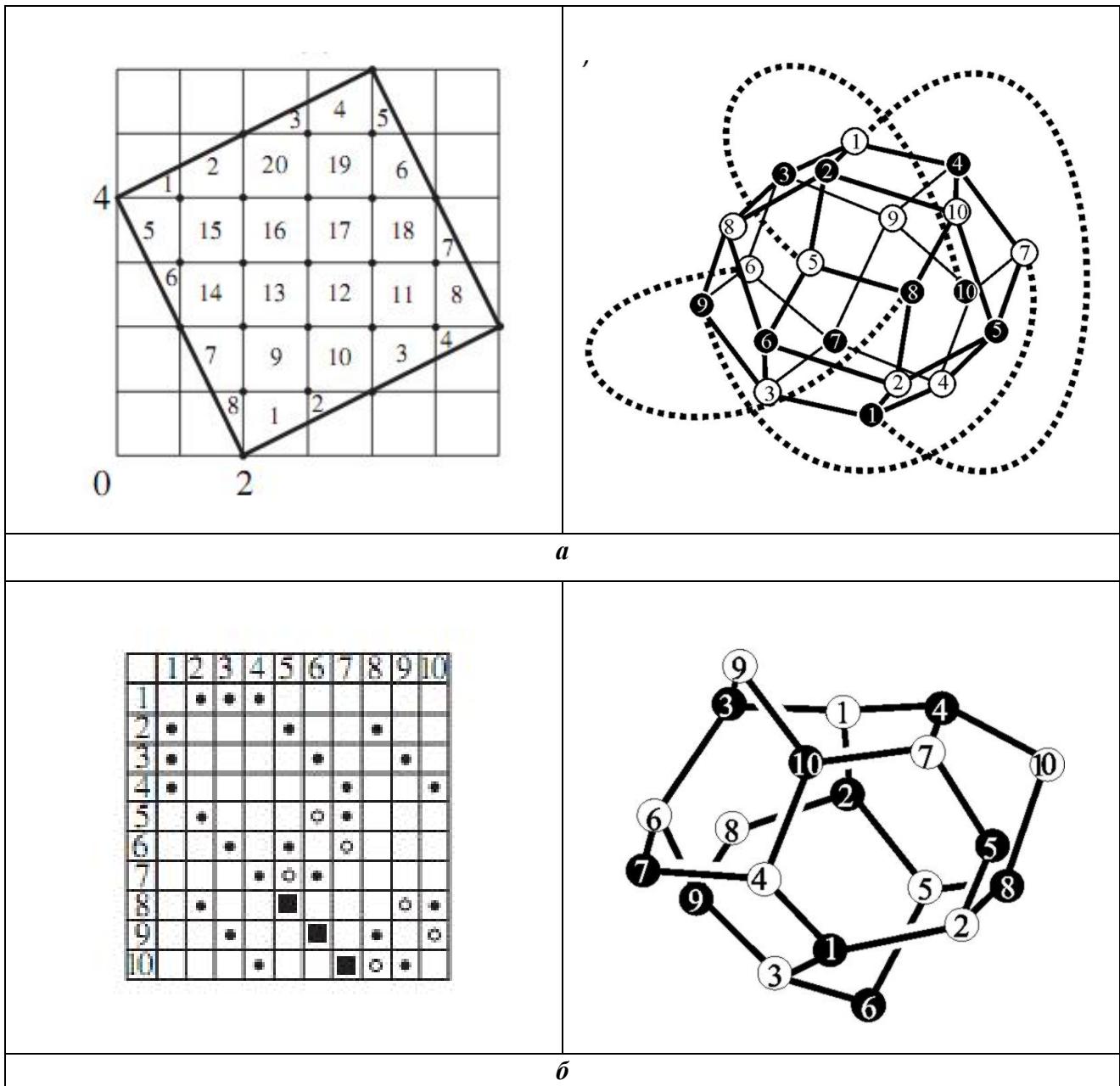


Рис.6.7. Карта $\{4,4\}_{4,2}$ на торе, нерегулярное разбиение сферы и равнореберный 20-вершинник, определяемый таблицей инцидентности $\{10_3^3\}^6$.

(a) Карта $\{4,4\}_{4,2}$ с 20 вершинами, 40 ребрами и 20 тетрациклами на торе и нерегулярное 20-вершинное бихроматическое разбиение сферы 36 ребрами на 18 тетрациклов. Показанные пунктиром 4 ребра отбрасываются при переходе от тора к сфере.

(б) Таблица инцидентности $\{10_3^3\}^6$, которая (без показанных пустыми кружками 6 знаков инцидентности) определяет граф 20-вершинника с 9 неплоскими гексагональными «гранями». Черные квадратики – знаки инцидентности, расширяющие конфигурацию Дезарга $\{10_3\}$ до $\{10_3^3\}$.

Если в таблице $\{10_3^3\}^6$ отбросить три знака, расширяющих $\{10_3\}$ до $\{10_3^3\}$, то получим таблицу $\{10_3\}^6$, определяющую разбиение сферы на 3 гексагона и 3 декагона. При дополнении этой таблицы стрелками, устанавливающими "инцидентность" между собой только столбцов и только строк, возникает таблица, которая определяет разбиение $\{10_3\}^6$ сферы на 3 тетра-, 6 пента- и 3 гексацикла. Это разбиение определяет полиэдр малой полости в газогидратах [282], обозначаемый символом $[4^3, 5^6, 6^3]$ (рис.6.8 δ).

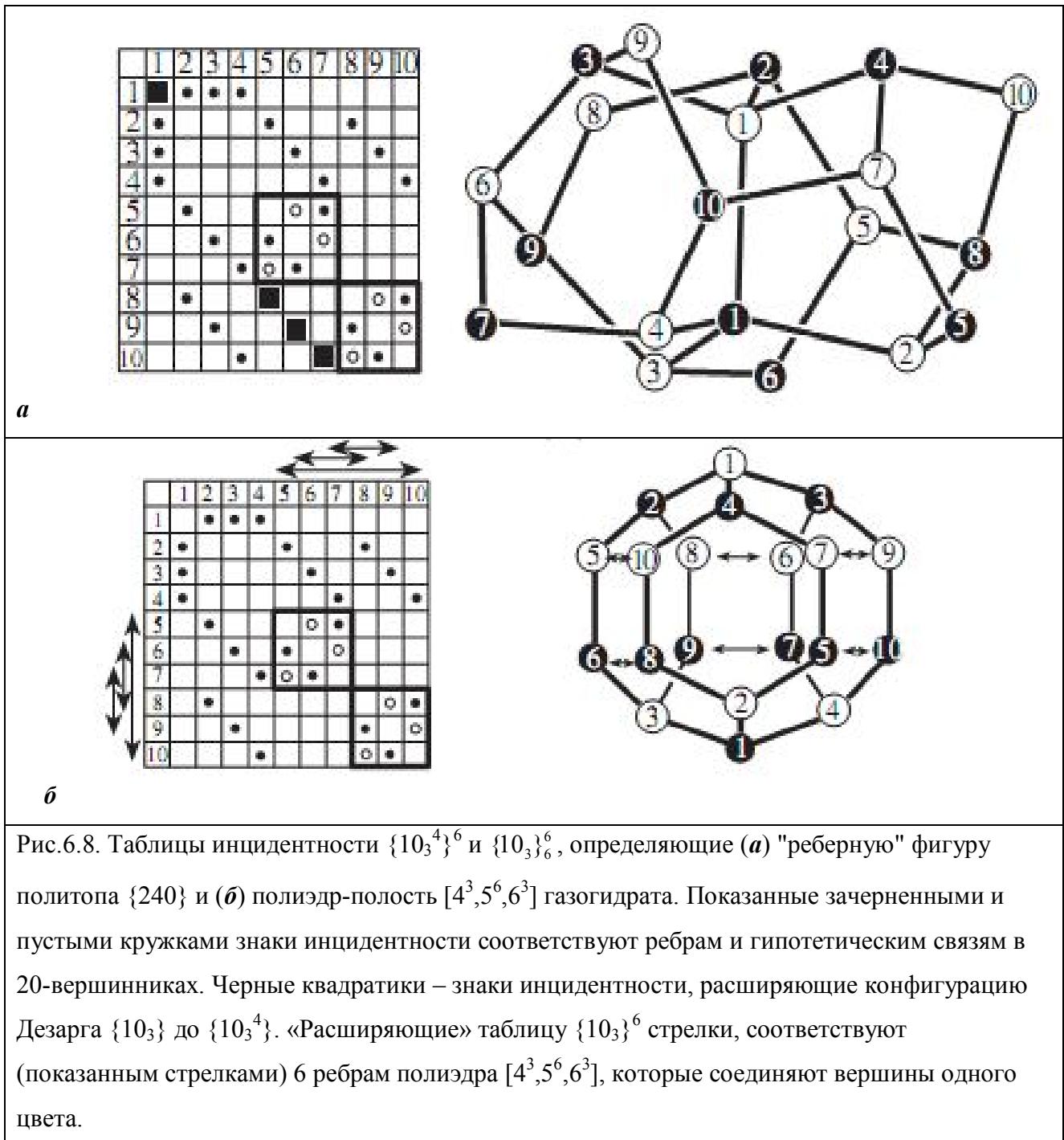


Рис.6.8. Таблицы инцидентности $\{10_3^4\}^6$ и $\{10_3\}^6$, определяющие (a) "реберную" фигуру политопа {240} и (б) полиэдр-полость $[4^3, 5^6, 6^3]$ газогидрата. Показанные зачерненными и пустыми кружками знаки инцидентности соответствуют ребрам и гипотетическим связям в 20-вершиннике. Черные квадратики – знаки инцидентности, расширяющие конфигурацию Дезарга $\{10_3\}$ до $\{10_3^4\}$. «Расширяющие» таблицу $\{10_3\}^6$ стрелки, соответствуют (показанным стрелками) 6 ребрам полиэдра $[4^3, 5^6, 6^3]$, которые соединяют вершины одного цвета.

Гексацикл, как граф минимальной конфигурации $\{3_2\}$, определяется таблицей 3×3 с 6 знаками инцидентности в ней. Поэтому таблицы, возникающие при смене троек знаков в двух выделенных квадратах 3×3 рассмотренных ранее таблиц, также могут определять 20-вершинники с тригональной симметрией. В частности, если в выделенных квадратах таблицы $\{10_3\}^6$ (т.е. $\{10_3\}_6^6$ без стрелок, рис.6.8) произвести замену троек знаков, то возникает таблица $\{10_3\}_{6(1)}^{6(1)}$ определяющая 20-вершинный кластер алмаза (рис.6.6б). Иными словами, таблицы $\{10_3\}^6$ и $\{10_3\}_{6(1)}^{6(1)}$ соответствуют различным вариантам отбрасывания 6 знаков из таблицы $\{10_3\}$. Возможны и иные варианты размещения троек знаков, например, таблица $\{10_3\}_{6(2)}^{6(2)}$, определяет разбиение сферы на 6 октациклов. Такое разбиение возникает из разбиения $\{4,4\}_{4,2}^4$ (рис.6.7а) при объединении 18 тетрациклов в 6 октациклов. Каждый октацикл может быть разделен ребром (соединяющим 2 вершины одного цвета) на 2 пентацикла, поэтому таблица $\{10_3\}_{6(1)}^{6(2)}$ определяет граф додекаэдра (рис.6.6а).

Соотношения между графиками рассмотренных подконфигураций ("обычных" и нагруженных" стрелками) специальной конфигурации Дезарга $\{10_3^4\}$, которые определяют равнореберные тригональные 20-вершинники, представлены в виде схемы:

$$\begin{array}{c} \{10_3^4\}^6 \supset \{10_3^3\}^6 \supset \{10_3\}_{6(1)}^{6(1)} \\ \Downarrow \qquad \Downarrow \\ [4^3, 5^6, 6^3] \leftrightarrow \{10_3\}_6^6 \leftrightharpoons \{10_3\}_{6(1)}^{6(2)} \leftrightarrow \{5, 3\}, \end{array} \quad (6.3)$$

где символы \supset , \leftrightarrow , \leftrightharpoons и \leftrightarrow обозначают, соответственно, включение, изоморфизм, алломорфизм [147] и возможность взаимного преобразования посредством элементарных операций (в частности, переброски ребер [29]).

6.3. Полиэдр Кельвина, группы $PSL(2,11)$, Матье и другие алгебраические группы

В 1887 году лорд Кельвин рассмотрел возможность разбиения E^3 на полиэдры, которые при фиксированном объеме имели бы минимальную поверхность. Найденное решение состояло в разбиении E^3 на (незначительно искривленные) параллелоэдры $[4^6, 6^8]$ с шестью квадратными и восемью гексагональными гранями и соответствовало структуре содалита или газогидрата IV. Только в 1994 году было показано [283], что к решению проблемы Кельвина ближе разбиение, составленное из равнообъемных додекаэдров $[5^{12}]$ и тетракадекаэдров $[5^{12}, 6^2]$, которое соответствует (искаженной) структуре газогидрата I. Результаты работ [281, 283, 284] позволяют считать $[4^6, 6^8]$ и $[5^{12}, 6^2]$ предельными, простыми (в каждой вершине 3 ребра), 24-вершинными полиэдрами ряда $[4^n, 5^{12-2n}, 6^{n+2}]$, который определяет упорядоченные структуры газогидратов. В частности, 10 полиэдров $[4^n, 5^{12-2n}, 6^{n+2}]$, $n=2,3,4,6$ являются стереоэдрами, генерирующими 23 кристаллографических разбиения E^3 .

В 1995 году на примере простого полиэдра (усеченного икосаэдра) было фактически конкретизировано одно из положений развивающегося подхода: точечная группа симметрии трактовалась как частный случай алгебраической группы дробно-линейных преобразований [184]. Для этого использовано знаменитое доказательство Галуа [16, 184] о возможности расширения группы вращений икосаэдра $Y=T \cdot C_5$ до произведения вида $T \cdot C_5 \cdot C_{11}$, изоморфного проективной специальной линейной группе $PSL_2(11)$, в которой подгруппа $C_5 \cdot C_{11}$ – борелева, T – группа вращений тетраэдра. При этом было указано на соответствие группового многообразия, отвечающего икосаэдру, системе корней решетки E_8 максимальной полупростой исключительной алгебры Ли e_8 [184, 275].

Решетка E_8 определяется как плотнейшая упаковка сфер S^7 в E^8 , при этом сфера S^7 представляет собой пространство главного расслоения для группы $SU(2)$, которая (как многообразие) соотносится с S^3 [15, 16]. Сфера S^2 , на которой расположены вершины полиэдра в E^3 , обладает экватором S_0^1 и может рассматриваться как объединение двух полусфер – дисков D_0^2 . Окружность S_0^1 может быть выбрана как окружность большого круга в сфере S^7 , а диск D_0^2 – как центральное сечение сферы S^7 плоскостью E^3 , проходящей через начало координат в E_8 [15]. Если E_8 ограничить на S^7 и определить S_0^1 как подгруппу диагональных матриц группы $SU(2)$ – подгруппу тора, тогда инварианты E_8 можно соотнести с D_0^2 . Любые преобразования D_0^2 без потери локальной минимальности сводятся к его

поворотам вокруг S^1_0 , которые представляют собой автоморфизмы $SU(2)$. Многограннику с вершинами на S^2 , соответствует однородное симметрическое пространство:

$$S^2 \cong SU(2)/U(1) \cong S^3 / S^1_0 \rightarrow ((D^2_0 \times S^1_0) \cup (S^1_0 \times D^2_0)) / S^1_0, \quad (6.4)$$

которое в итоге определяет возможность использования инвариантов E_8 для решения поставленной задачи. Например, инвариант 24 соотносится с группой Гурвица из 24 единичных кватернионов, являющейся калибровочной для $SU(2)$ при задании расслоений. Инвариант 18 будет использован при построении алгебраического политопа, определяемого (при соответствующем выборе начала координат) 144 векторами из первой координационной сферы решетки E_8 .

Соотношение (6.4) делает возможным конфигурационное вырождение, обусловленное принадлежностью D^2_0 и к решетке E_8 , и к дуальной (и совпадающей с ней) решетке E_8^* [16]. Возможность снятия такого вырождения определяет особую роль 4-мерного нерегулярного политопа $\{720\} \cong \{3,3,5\} \cup \{5,3,3\}$, где $\{5,3,3\} \cong \{3,3,5\}^*$ – политоп дуальный $\{3,3,5\}$ [188]. Политоп $\{5,3,3\}$ представляет собой объединение 5 конгруэнтных политопов $p\varphi\{3,3,5\}$, $p^5=1$, $\varphi^2=1$, в котором вершины $\varphi\{3,3,5\}$ центрируют 120 тетраэдров из $\{3,3,5\}$ и наоборот – вершины $\{3,3,5\}$ центрируют 120 тетраэдров из $\varphi\{3,3,5\}$. Последнее позволяет определить политоп:

$$\{240\} \cong \{3,3,5\} \cup \varphi\{3,3,5\}, \quad [3^{4,2,1}] \supset \varphi \notin [3,3,5] \supset p, \quad (6.5)$$

где $O' \times Y'$, $Y' \times Y'$ и $[3^{4,2,1}]$ – группы симметрии политопов $\{240\}$, $\{3,3,5\}$ и системы E_8 , а пересечением групп $Y' \times Y'$ и $\varphi(Y' \times Y')$ φ^{-1} является группа $T' \times Y'$. Группы Y' , O' , T' – бинарные группы икосаэдра, октаэдра и тетраэдра, гомоморфные группам вращений Y , O , T вдвое меньшего порядка [6, 22, 24, 188].

Трехмерным аналогом $\{720\}$ является триоконтаэдр, вершины которого представляют собой объединение «белых» вершин регулярного икосаэдра $\{3,5\}$ и «черных» додекаэдра $\{5,3\} = \{3,5\}^*$. Из 20 вершин додекаэдра 8 принадлежат кубу $\{4,3\}$, а 12 – прямому икосаэдру $\{3,5\}_n^*$, который является орбитой подгруппы $T_h = O_h \cap Y_h$ группы Y_h , что позволяет разбить 24 из 30 ромбических граней триоконтаэдра на 8 троек, центрами которых являются вершины $\{4,3\}$. Каждая такая тройка ромбов представляет собой неплоский гексагон с «внутренней» вершиной и тремя внутренними ребрами, отбрасывание которых (по Т-процессу [7, 190]) позволяет перейти к топологическому параллелоэдру:

$$[4^{30}] \cong [4^6] \cup [4^{8-3}] \cong [4^6] \cup [4^3]^8 \xrightarrow{T} [4^6, 6^8]', \quad (6.6)$$

в котором $[4^6]$ – 6 ромбов триоконтаэдра с центрами по вершинам октаэдра
 $\{\pm 1, 0, 0; 0, \pm 1, 0; 0, 0, \pm 1\}$

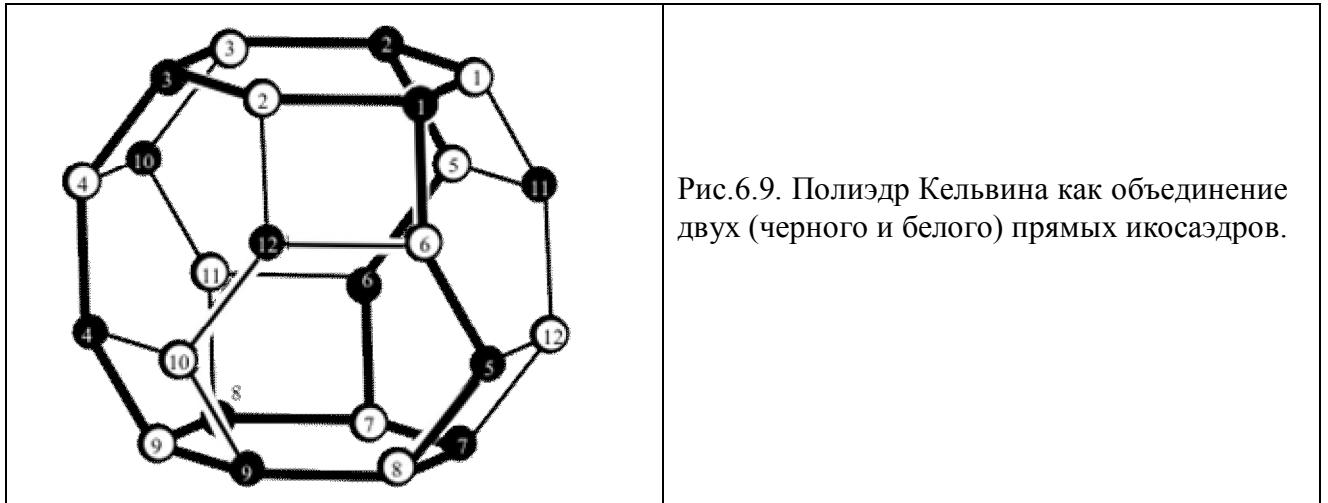


Рис.6.9. Полиэдр Кельвина как объединение двух (черного и белого) прямых икосаэдров.

Преобразования (6.6) характерны для локальных фазовых переходов (не реализующихся без наноструктурирования системы [272]), которые можно рассматривать как гомотопически-инвариантные фазовые превращения, обусловленные закономерным изменением типа триангулированности. Для двумерной поверхности триангуляция выполняется при условии принадлежности каждой точки поверхности хотя бы одному треугольнику и пересечении двух треугольников по одному ребру (или по одной вершине). Эйлерова характеристика χ системы (задаваемая числом вершин, граней и ребер) является гомологическим и топологическим инвариантом поверхности, поэтому она представляет собой своеобразную характеристику масштабно-инвариантного топологического объема. Следовательно, локальные фазовые превращения должны определяться Т-процессами, для которых $\chi = \text{const}$ [7, 12, 190]. В частности, к таким процессам относятся различные комбинации (прямых и обратных) операций одномерного и двумерного подразделения: ребро и грань делятся на 2 части соответственно вершиной и ребром.

В реальных физических системах подобные Т-процессы связаны с необходимостью одинаковой гибридизации связей, а следовательно, с их равнодлинностью при локальной минимальности задаваемой ими поверхности. Для $[4^6, 6^8]'$ требование равнореберности и

двумерности граней определяет переход к параллелоэдру $[4^6, 6^8]$, вершины которого принадлежат двум конгруэнтным прямым икосаэдрам [33]:

$$\{[4^6, 6^8]\}' \cong \{3,5\} \cup \{3,5\}_n \rightarrow \{[4^6, 6^8]\} \cong \{3,5\}_n \cup m_d\{3,5\}_n , \quad (6.7),$$

где m_d – диагональная плоскость симметрии куба (рис.6.9) Группой симметрии $[4^6, 6^8]$ является группа $O_h = T_h \cup m_d T_h$, где T_h – группа симметрии $\{3,5\}_n$ и $m_d\{3,5\}_n$.

Таким образом, 30-гранный триоконтаэдр Т-эквивалентен 14-гранному параллелоэдру Федорова-Кельвина $[4^6, 6^8]$

Из 24 вершин параллелоэдра 12 белых соответствуют вершинам $\{3,5\}_n$, а 12 черных – $m_d\{3,5\}_n$; каждая белая (черная) вершина окружена тремя черными (белыми). Таким образом, (6.7) представляет $[4^6, 6^8]$ как трехмерный аналог $\{240\}$ – объединение двух прямых икосаэдров элементом симметрии 2 порядка (рис.6.9). Дуальным к $[4^6, 6^8]$ полиэдру является гексатетраэдр, определяемый 14-вершинным разбиением сферы на 24 треугольника. Соответствующее ему объединение 24-тетраэдров представляет собой пример симплексиального комплекса. Рассматриваемые в [281] 24-вершинные полиэдры $[4^n, 5^{12-2n}, 6^{n+2}]$, фактически получены как дуальные к 14 вершинным триангуляциям сферы.

Вершины полиэдра Кельвина $[4^6, 6^8]$ с группой симметрии $O_h = T_h \cup m_d T_h$, принадлежат двум конгруэнтным прямым икосаэдрам:

$$[4^6, 6^8] \cong \{3,5\}_n \cup m_d\{3,5\}_n , \quad (6.8),$$

где m_d – диагональная плоскость симметрии куба (рис.6.9), T_h – группа симметрии прямого икосаэдра $\{3,5\}_n$, в котором 8 треугольников правильные, а 12 – равнобедренные. Каждая вершина $\{3,5\}_n$ окружена тремя вершинами $m_d\{3,5\}_n$ и наоборот. В [184] было показано, что 12 борелевских подгрупп группы $PSL_2(11)$ соотносятся с 12 вершинами икосаэдра. В соответствие с доказательством Галуа [16], только группы $PSL_2(p)$, $p = 3, 5, 7, 11$ транзитивны на множествах p и $p+1$ элементов.

Группу $PSL_2(11)$ можно представить в виде произведения точечной группы T и неточечной группы $M_{5,11}$: $PSL_2(11) = T \cdot M_{5,11}$. (рис. 1.28). Множество вершин икосаэдра изоморфно совокупности смежных классов:

$$Y/C_5 \leftrightarrow PSL_2(11)/M_{5,11} = \bigcup_{i=1}^{12} g_i M_{5,11}, \quad g_i \notin M_{5,11} = C_5 S C_{11}, \quad (6.9)$$

где $PSL_2(11)$ – группа автоморфизмов проективной прямой $PL(11)$, которая в качестве подгруппы индекса 12 содержится в группе Матье M_{11} [16, 22]. Группа $PSL_2(11)$ – одна из двух возможных групп автоморфизмов проективной прямой $PL(11)$, которая состоит из 11 точек, соответствующих инволюциям, и точке на ∞ . Метациклическая группа $M_{5,11}$ изоморфна полупрямому произведению C_5 на C_{11} . Параллелоэдр $[4^6, 6^8]$ – объединение двух конгруэнтных 12-вершинных (прямых) икосаэдров, обладающее группой симметрии O_h , поэтому, его симметрию должна отображать группа, включающая $PSL_2(11)$ и O_h в качестве подгрупп. Трактовка параллелоэдра $[4^6, 6^8]$ как удвоенного инволютивным преобразованием икосаэдра означает, что искомая группа должна быть подгруппой группы S_{12} перестановок 12 символов.

Итак, для отображения симметрии его графа, необходимо использовать максимальную подгруппу симметрической группы S_{12} (перестановок 12 символов), которая удовлетворяет всем этим условиям. Такой подгруппой является группа $2M_{12}$ (расширение группы Матье M_{12} элементом 2 порядка), множество смежных классов которой по M_{11} изоморфно совокупности вершин $[4^6, 6^8]$:

$$O_h/C_{1v} \leftrightarrow 2M_{12}/M_{11} = \bigcup_{i=1}^{12} 2g_i M_{11} = \bigcup_{i=1}^{144} g_i 2PSL_2(11), \quad (6.10)$$

где 2 – группа 2 порядка, нетривиальный элемент которой отображает друг в друга две несопряженные подгруппы M_{11} группы M_{12} . Группа Матье M_{12} определяется при введении на множестве 12 элементов ($\infty, 0, 1, \dots, 10$) петлевого умножения [16]. Ее расширение элементом 2-го порядка – группу $2M_{12}$ составляют автоморфизмы многообразия Ω над полем Галуа $GF(3)$ с базисными векторами $x_i, i \in PL(11)$ [16]. Подгруппа $M_n^j \cdot S_{12-n}$, $n = 8, 9, 10, 11$, отображает на себя определенное подмножество векторов (или их образов) из Ω . Группы PSL_2^j отображаются друг в друга внешним автоморфизмом θ , $\theta^2 = 1$, который расширяет группу $2M_{12}$ до $2M_{12}2$ [16]. Данный автоморфизм аналогичен внешнему автоморфизму для некристаллографической группы H_4 , который сопрягает оба ее неэквивалентных представления и является внутренним автоморфизмом E_8 [27].

Можно показать, что существует изоморфная $M_n^j \cdot S_{12-n}$ параболическая подгруппа P_n (структурной алгебраической группы), порожденная инволюциями, которым соответствует подмножество Δ_n , базы Δ системы E_8 . Иными словами, можно установить изоморфное соответствие между подмножествами векторов Ω и E_8 . В общем случае, P_n соответствует разложение Леви [30]: $P_n = L_n(E_8) \cdot R_u$, в котором подгруппы $L_n(E_8)$ и R_u имеют порядок $24 \cdot (n -$

$7)!$ и $n = p^t$, где p – простое число, t – целое. Группа $L_n(E_8)$ соотносится с набором из 24 векторов решетки E_8 , который удовлетворяет (6.6). Накладывая на множество векторов Δ_n определенные соотношения, можно перейти к множеству Δ_n^m и, соответственно, – к параболической подгруппе $B_m W_n^m B_m$ алгебраической (редуктивной) группы G_m . В такой группе B_m – борелева подгруппа, W_n^m – подгруппа группы Вейля W системы E_8 , которая порождается инволюциями, соответствующими векторам из Δ_n^m . Редуктивная группа G_m факторизуема в виде произведения центризатора $Z(G_m)$ и коммутанта (G_m, G_m) , который может играть ту же роль, что и подгруппа трансляций в федоровской группе [37]. Суммируя вышеизложенное, получаем соотношения:

$$M_{12} \supset M_n^j \cdot S_{12-n} \leftrightarrow P_n \cong L_n(E_8) \cdot R_u \rightarrow B_m W_n^m B_m \subset G_m \cong (G_m, G_m) \cdot Z(G_m), \quad (6.11)$$

которые на групповом уровне определяют возможность перехода от “стартового” полиэдра к объединению бесконечного числа полиэдров. Соотношения (6.10), (6.11) фактически сопоставляют множеству векторов, идущих в середины ребер (вершины) параллелоэдра $[4^6, 6^8]$, подмножество векторов из E_8 , которое позволяет построить 3-мерную решетку Бравэ (ОЦК). Полиэдр, отображаемый в параллелоэдр $[4^6, 6^8]$ преобразованием m , которое сохраняет число вершин, ребер и граней и вкладывается в $2M_{12}2$, назовем M -эквивалентным $[4^6, 6^8]$. Если стартовый для (6.7) параллелоэдр заменить M -эквивалентным полиэдром, соответствующее ему подмножество Δ_n^m системы E_8 будет определять 3-мерную систему векторов (решетку), которая может и не являться решеткой Бравэ.

6.3.1. Алгебраическое определение таблицы инцидентности бихроматического графа полиэдра Кельвина $[4^6, 6^8]$

Симплектическая унитарная группа $\mathrm{Sp}(1) \cap \mathrm{SU}(2)$ сохраняет площадь параллелограмма, «натянутого» на пару векторов, поэтому использование таких групп позволяет соотнести линейные преобразования с многообразием Грассмана $G_{2,1}$, которое связано с множеством середин геодезических и изоморфно $\mathrm{SU}(2) \cong \mathrm{Sp}(1) \cap \mathrm{su}(2)$, где $\mathrm{su}(2)$ – алгебра [15]. Многообразие $G_{n,d}(V)$ позволяет получить и проективное многообразие, определяемое цепочкой $0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_i \subset V_{i+1} \dots \subset V_n$ – подпространств векторного пространства V . Если V_n совпадает с V и размерность V_{i+1} больше V_i на 1, то цепочка – полный флаг в V ; при невыполнении таких условий – флаг частичный. Совокупность полных флагов образует проективное многообразие $\Gamma(V)$, при этом для каждого частичного флага его стабилизатор в алгебраической группе G является параболической подгруппой P , содержащей борелеву подгруппу B .

При наличии неподвижных точек замкнутая разрешимая подгруппа H группы $GL(n, K)$ оставляет неподвижным и некоторый флаг, так что соответствующая группа G триангулируема при наличии цепочки симплексов размерности 0, 1 и 2, а именно, вершин, ребер и граней (треугольников). Выбор рационального представления $G \rightarrow GL(V)$ используется для отождествления группы H со стабилизатором в G точки, соответствующей прямой проективного пространства $P(V)$. Многообразие G/H , отвечающее орбите прямой в $P(V)$, является квазипроективным (как пересечение открытого и замкнутого проективного подмногообразий) [30]. Каноническое отображение $GL(2, K) \rightarrow PGL(2, K)$ определяет автоморфизмы, индуцированные действием группы $GL(2, K)$ на ненулевые векторы подмножества K^2 поля K . Проективную прямую P^1 можно рассматривать как множество всех “прямых” в K^2 , проходящих через начало координат. Поскольку группа $PGL(2, K)$ соотносится с редуктивными группами, а P^1 – с многообразием G/B , появляется возможность задать редуктивную группу G в виде (6.11). При этом коммутант (G, G) определяется тем, что коммутаторы множества неприводимых перестановочных матриц образуют алгебру с делением.

Рассматриваемым полиэдром соответствует множество $V(S^2)$ векторов, идущих к вершинам тетраэдров, которые разбивают сферу S^2 . Соотнесение $V(S^2)$ с определенным флагом позволяет получить аффинное, проективное или квазипроективное многообразие при отображении: $V(S^2) \rightarrow G/N$, G/P (G/B), G/H , где N – нормальная подгруппа G [30]. «Происхождение» параллелоэдра $[4^6, 6^8]$ из триоконтаэдра однозначно определяет частичный

флаг посредством разбиения 12 белых (черных) вершин, соответствующих $\{3,5\}$ ($\{3,5\}'_n$), на 12 треугольников, каждый из которых содержит одну черную (белую) вершину, соответствующую $\{3,5\}'_n$ ($\{3,5\}_n$). Одновременно каждая из 12 белых (черных) вершин $[4^6, 6^8]$ является ближайшей для пяти других белых (черных) вершин, а именно, в ней сходятся 5 треугольников.

Поле Галуа $GF(q)$ характеризуется аддитивной $G_a(q)$ и мультипликативной $G_m(q)$ группами, определяемыми таблицами сложения и умножения элементов поля. Морфизм алгебраических групп $G \rightarrow G_\alpha \leftrightarrow U_\alpha$, (здесь α соотносится с вектором из E_8 [30]), определяет проективную прямую из $q+1$ точки, а именно, группе G_α соответствуют "прямые", проходящие через одну точку (начала координат). Поскольку любое конечное упорядоченное множество сводится к линейно-упорядоченному, для $GF(q)$ можно ввести таблицу $(q+1) \times (q+1)$, отображающую таблицу умножения мультипликативной группы $G_m(q)$. Такая таблица определяется единственной подалгеброй, задаваемой элементами поля $GF(q)$ над полем комплексных чисел. Можно показать, что для $GF(11)$ (а значит, и для $PL(11)$, на которой действуют группы, определяемые соотношением (6.11), возможно построение проективного многообразия, определяемого таблицей 12×12 и соответствующего подсистеме из 144 векторов E_8 .

Экваториальное сечение (начиная с ячейки) 24-вершинного политопа $\{3,4,3\}$ "плоскостью" E^3 дает кубооктаэдр, "северное" и "южные" сечения параллельными "плоскостями" E^3 дают + и - октаэдры. Середины всех 96 ребер $\{3,4,3\}$ представляют собой вершины политопа $sn\{-3,4,3\}$, которые (при движении от северного к южному полюсу S^3) могут быть разделены на 12 середин ребер "арктического" (+) октаэдра, 24 северных середин ребер, 24 середин ребер экваториального кубооктаэдра, 24 южных середин ребер и 12 середин ребер "антарктического" (-) октаэдра. При проекции их в E^3 получаем вершины полиэдров, расположенных на концентрических сферах. В порядке убывания радиусов это: антарктический кубооктаэдр, южный $[4^6, 6^8]$, экваториальный ромбокубооктаэдр, северный $[4^6, 6^8]$ и арктический кубооктаэдр (рис.5.11а). Отбросив полюсные кубооктаэдры, получаем 72-вершинный политоп $\{72\}$, симметричный относительно экваториальной плоскости $\{3,4,3\}$. Вершины ромбокубооктаэдра можно разбить на подмножества $2(2 \times 6)$ экваториальных вершин, а оставшиеся 48 неэкваториальных вершин могут быть разделены на подмножества $2(2 \times 12)$ вершин. Полученный таким образом политоп $\{72\}$ с $72=2((6+12)+(12+6))$ вершинами определяет подсистема $E_8(hole)$ из $2(2(2 \times 18))$ векторов.

Такая подсистема определяет расположенный на S^3 72-вершинный алгебраический политоп, который задается инвариантом 18 системы E_8 [16, 22, 65]. Трактовка S^2 как слоя в расслоении для S^3 означает, что на (базу) S_0^1 и S^2 отобразятся 2 и 36 (по 18 на каждый диск

D_0^2) вершин такого политопа. С учетом строения многообразия, задаваемого определенной таблицей 12×12 (рис.6.10), ее подтаблица из 36 клеток будет соответствовать 36 вершинам на S^2 , которые соотносятся с серединами ребер полиэдра. При переходе к ассоциированному с (6.4) расслоению число вершин на S^2 можно представить в виде суммы (определенного в (6.4)) инварианта 24 и инварианта 12. Система E_8 является 7-схемой [16], в соответствии с которой инвариант 24 может быть задан в виде $24 = 3(7+1)$, где 7 – показатель E_8 [63, 65]. Наиболее симметричным строением таблицы 12×12 , отображающим приведенные соотношения, является ее разбиение на 2 диагональных и 2 недиагональных блока, которые содержат только 21, 3, 6 и 6 заполненных клеток соответственно (рис.6.10). Для отображения триангуляции структуры в соответствии с (6.6) в каждой строке и каждом столбце таблицы должно быть только по 3 заполненных клетки. Задание Ω над $GF(3)$ должно отображаться в разбиении таблицы на подблоки 3×3 , в каждом из которых может находиться одна или две тройки заполненных клеток, определяемых таблицей сложения $GF(3)$ [21]. Суммируя вышеизложенное, получаем соотношение:

$$144 = 8 \cdot 18 = 72 + 72 \rightarrow 72 = 2 \cdot 36 \rightarrow 36 = 24 + 12 = (21+3) + 2(3+3), \quad (6.12)$$

которое определяет отображение подсистемы E_8 на S^2 посредством наиболее симметричного расположения заполненных клеток в таблице 12×12 .

Существует единственный вариант таблицы 12×12 , который удовлетворяет соотношениям (6.9), (6.10), (6.12). Это таблица инцидентности (ТИ) бихроматического графа параллелоэдра Федорова-Кельвина, в которой столбцу соответствует белая вершина, строке – черная, а знаку инцидентности – соединяющее их ребро (рис.6.10). Действительно, в каждом столбце (строке) ТИ имеется только 3 знака инцидентности, каждый столбец (строка) пересекается только с 5 столбцами (строками) и только при разбиении ТИ на диагональные блоки $1-9 \times 1-9$ и $10-12 \times 10-12$ (которое соответствует подгруппе $M_9 \cdot S_3$ группы M_{12}) в них содержится 21 и 3 знака, а в двух недиагональных блоках – по 2 подблока из 3 знаков. Число знаков в подблоках кратно 3, а их расположение определяется таблицей сложения $GF(3)$. Можно показать, что 24 знака в диагональных блоках соотносятся с группой Гурвица и системой корней D_4 . Решетка D_4 – самодуальная, так что $D_4 = D_4^* \supset D_3^* = A_3^*$, где A_3^* – ОЦК решетка [16], поэтому данное соотношение определяет $[4^6, 6^8]$ как параллелоэдр – многогранник Дирихле для ОЦК-решетки.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	●	●				●						
2	●		●		●							
3		●	●	●								
4				●				●		●		
5					●		●	●				●
6				●		●				●		
7						●	●					●
8						●		●			●	
9						●	●	●				
10			●	○						●		
11	●			○								●
12		●			○					●		

Рис.6.10. Таблица инцидентности бихроматического графа параллелоэдра Кельвина

В работе [147] была введена конфигурация 12_3 конечной проективной геометрии, которую образуют 12 (белых) точек и 12 «прямых» (черных точек); при этом каждая «прямая» состоит из 3 точек, а через каждую точку проходит 3 прямые. Графом инцидентности такой конфигурации является граф $\{12\} + \{12/5\}$, а бихроматическим графом инцидентности 12_3 является карта $\{6,3\}_{2,2}$ из 12 гексагонов на торе. В ТИ PG(2,q) запрещено образование прямоугольников из знаков инцидентности, поскольку, в противном случае, через две точки конечной проективной плоскости проходили бы 2 различные прямые. В рассматриваемой таблице инцидентности (рис.6.10), запрет проективной геометрии на образование прямоугольников из знаков инцидентности выполняется только в пределах диагонального блока 9x9.

Как было рассмотрено в главе 1, конечная проективная геометрия PG(2,q) представляет собой систему Штейнера $S(2, q+1, q^2+q+1)$ – множество q^2+q+1 точек, в котором любые две точки всегда принадлежат только одному подмножеству из $q+1$ точки. Система Штайнера – соответствует t -(v,k,λ)-схеме при $\lambda=1$, где t -(v,k,λ)-схема – множество из v элементов, разбитое на подмножества (блоки) из k элементов так, что любые t элементов содержатся в λ блоках. Во всей определенной выше ТИ (рис.6.10) запрет проективной геометрии на образование прямоугольников из знаков инцидентности снят, что позволяет считать ее ТИ 12_3 , расширенной с использованием аппарата t - (v, k, λ) – схем [16, 147].

6.3.2. Замкнутый набор простых 24-вершинных, 14-гранных полиэдров, эквивалентных $[4^6, 6^8]$ по группе Матье M_{12}

Сохранение (в соответствии с принципом унитарных ограничений) алгебраически существенной части условий (6.9), (6.10), (6.12) позволяет перейти от графа параллелоэдра $[4^6, 6^8]$ к M -эквивалентному ему простому 24-вершинному графу. В частности, в силу определяемого (6.11) соотношения $M_{12} \supset M_9 \cdot S_{12-9} = M_9 \cdot S_3$ получаем, что для ТИ $12_3(M_9 \cdot S_3)$ алгебраически существенными являются два требования: вложение подтаблицы 9×9 в ТИ конфигурации $(9_3)_2$ конечной проективной геометрии [146] и равенство соответствующему инварианту E_8 числа знаков в диагональных блоках. С учетом существования инвариантов 18, 24, 30 системы E_8 кратных трем, соотношение для знаков инцидентности в ТИ $12_3(M_9 \cdot S_3)$ может быть представлено в виде: $\{(3(7+f)U3(1+|f|)\}, f = 0, \pm 1$. Старшему инварианту 30 соответствует объединение 24 знаков диагональных блоков ТИ $12_3(M_9 \cdot S_3)$ с 6 знаками двух подблоков недиагональных блоков. Если такими подблоками являются $1-3 \times 10-12$ и $10-12 \times 7-9$, то 30-значная подтаблица ТИ $12_3(M_9 \cdot S_3)$ определяет гексагональную призму, каждое из вертикальных ребер которой разделено двумя дополнительными вершинами.

Число вершин ребер и циклов (граней) назовем эйлеровым набором, если два и более чисел в наборе – инварианты E_8 . Можно показать, что эйлеровы наборы соответствуют характеристическим элементам расслоений, в частности, отображению при "измельчении" триангуляции [15]. Переход между такими наборами представляет собой один из вариантов снятия конфигурационного вырождения. Например, добавление 2 вершин, 1 грани и 3 ребер соответствует "усечению" вершины тетраэдра и может быть обозначено символом $(2,1,3)$, в котором сумма двух первых чисел равна третьему. В общем случае, все это комбинации исходных наборов $(1,0,1)$ или $(0,1,1)$, которые меняют только число ребер и вершин или только число ребер (псевдоребер) и граней (псевдограней). Параллелоэдру $[4^6, 6^8]$ соответствует эйлеров набор $(24, 36, 14)$, гексагональной призме – $(12, 18, 8)$, а рассматриваемой декорированной призме – $(24, 30, 8)$; таким образом, параллелоэдр Федорова-Кельвина можно рассматривать как результат снятия вырождения с гексагональной призмы посредством инволютивного расширения.

Набор $(24, 30, 8)$ определяет призматическую трактовку $[4^6, 6^8]$: два параллельных гексагона основания и 6 боковых 8-угольных граней, каждая из которых разделяется внутренним ребром на квадрат и шестиугольник. В ТИ $12_3(M_9 \cdot S_3)$ такие ребра определяются знаками в подблоках $4-6 \times 10-12$ и $10-12 \times 7-9$ недиагональных блоков. Знаки инцидентности в подобных подблоках определяют горизонтальные ребра в призматической трактовке $[4^6, 6^8]$, поэтому назовем такие подблоки горизонтальными (рис.6.10). При переброске конца

внутреннего ребра в соседнюю вершину (того же цвета, что и начало ребра) боковая 8-угольная грань разделяется на два 5-угольника. Цикл с нечетным числом вершин не может быть бихроматическим, поэтому существование 5-угольного цикла нарушает требование "глобальной триангулированности", определяемое соотношением (6.12). В частности, в 5-угольнике, разбитом на треугольники, соединение середин "противоположных" ребер не сводится к измельчению триангуляции. Замена в простом 24-вершинном бихроматическом графе $2k$ бихроматических ребер на монохроматические (между вершинами одного цвета) требует отбрасывания из ТИ $2k$ знаков и введения стрелок, которые, в терминах проективной геометрии, определяют инцидентность между вершиной и вершиной (прямой и прямой). Алгебраически существенными являются только диагональные блоки, поэтому уменьшение числа знаков допустимо только в недиагональных.

Суммируя вышеизложенное, определим требования к ТИ $12_3(M_n \cdot S_{12-n})$, которая задает простой 24-вершинный граф, М-эквивалентный $[4^6, 6^8]$: блок $n \times n$ вкладывается в ТИ конфигурации n_3 конечной проективной геометрии, а строение всей ТИ определяется соотношением:

$$2 [3 + (3 - k_i^j(f))] \cup \{(3(7+f) \cup 3(1+|f|)\} + \delta(k, f) = 36, \quad (6.13)$$

где в квадратной и фигурной скобках указано число знаков в недиагональном и диагональных блоках; $\delta(k, f) = 2k_i^j(f) - 3(f+|f|)$ – число монохроматических стрелок. Для краткости, вместо символа ТИ $12_3(M_n \cdot S_{12-n})$, определяющего данную ТИ, будем использовать символ ТИ $M_n S_{12-n}(f, k)$; например, граф параллелоэдра $[4^6, 6^8]$ будет характеризоваться символом ТИ $M_9 S_3(0, 0)$.

Рассмотрим все М-эквивалентные полиэдры (клUSTERы), графы которых определяются ТИ $M_9 S_3(f, k)$, удовлетворяющей (6.13). Условия $f = 0$, $k_i^j(0) = 0, 1, 2$, $\delta = 2k$ определяют возможность замены $2k$ боковых граней $[4^6, 6^8]$ на $2k$ пар 5-угольников по механизму:

$$[4^6, 6^8] \cong [(4 \cup 6)^{6-2k}, (4 \cup 6)^{2k}, 6^2] \leftrightarrow [((4 \cup 6)^2)^{3-k}, ((5^2)^2)^k, 6^2] \cong [4^{6-2k}, 5^{4k}, 6^{8-2k}], \quad (6.14)$$

где $(4 \cup 6)^2$ и $(5^2)^2$ – декациклы, возникающие при объединении пары боковых октагонов или двух пар 5-угольников.

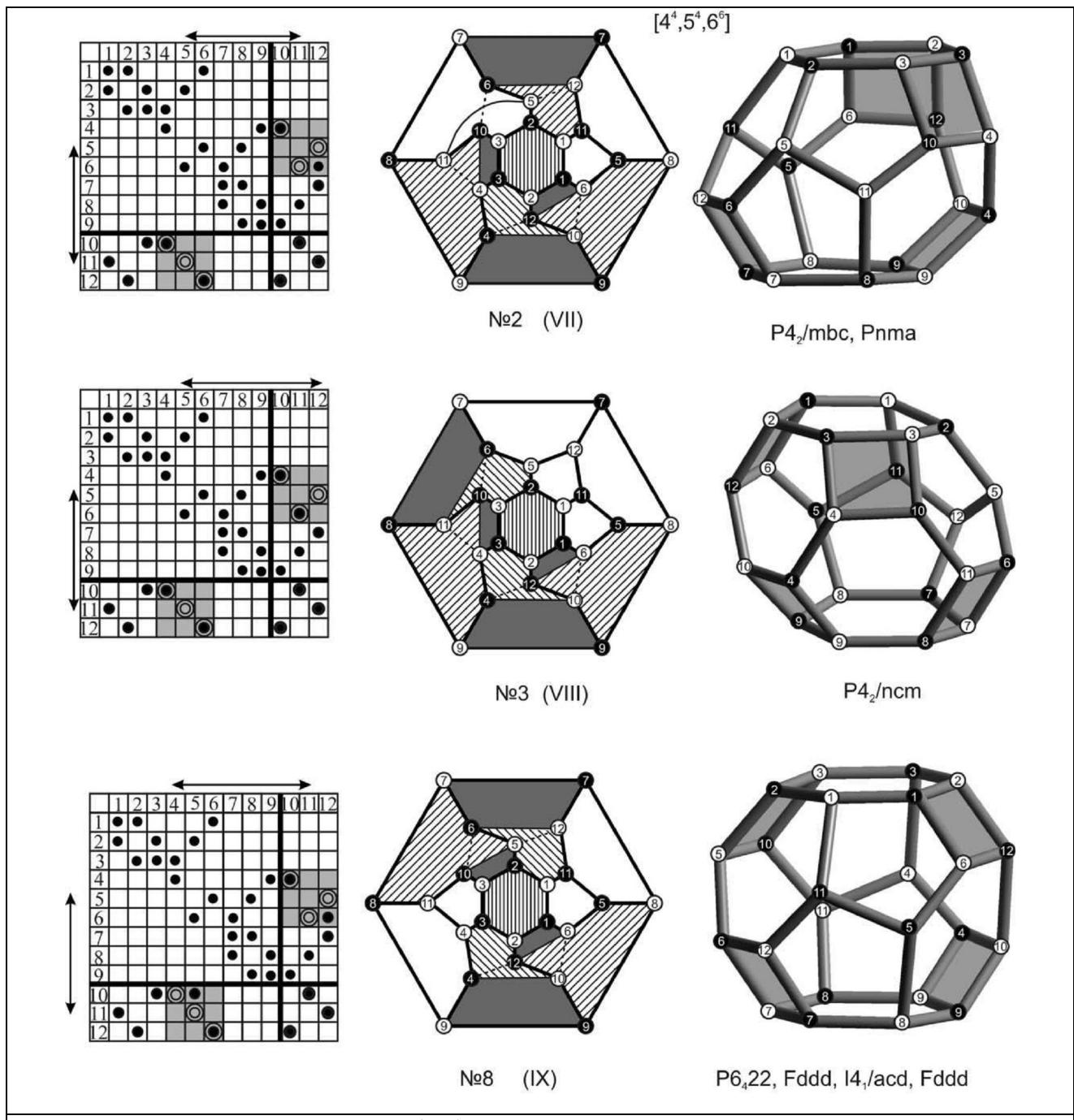


Рис.6.11. Таблицы инцидентности (ТИ), определяемые ими диаграммами Шлегеля, которые определяют графы стереоэдров $[4^4, 5^4, 6^6]$. Жирные линии выделяют в ТИ блоки 9×9 и $10-12 \times 10-12$. Стрелки у ТИ определяют инцидентность столбцов (строк), которым соответствуют ребра, соединяющие вершины одного цвета. ТИ отличаются друг от друга только светло-серыми квадратами, в которых двойные кружки (по сравнению с ТИ рис.6.10) отброшены. На определяемых ТИ диаграммах Шлегеля 4-угольники закрашены темно-серым, гексагоны базы – вертикальной штриховкой, боковые гексагоны – косой штриховкой. Ребра пентагонов на диаграмме Шлегеля тетракадекаэдра показаны пунктиром. Под каждой диаграммой дается номер стереоэдра согласно [284], а в скобках - согласно [281]. Федоровская группа, размножающая данный стереоэдр приведена под каждым из них.

Варианту $k = 0$ соответствует параллелоэдр $[4^6, 6^8]$ (рис.6.9); $k = 1$ – стереоэдры №2, 3, 8 (рис.6.11); $k = 2$ – стереоэдры №5, 7, 9 (рис.6.12). Стереоэдр №10 (рис.6.12) определяется ТИ, которая возникает из ТИ для №9 под действием автоморфизма θ , поэтому данный полиэдр обозначим символом $[4^2, 5^8, 6^4]^0$.

Условия $f = 0, k = 3, \delta = 2k$, в соответствии с (6.14), определяют тетракадекаэдр $[5^{12}, 6^2]$ (рис.6.13a), который не является стереоэдром. По определению, $TIM_9S_3(0,0)$ задает параллелоэдр, следовательно, возможность М-эквивалентного ему полиэдра быть стереоэдром (то есть генерировать кристаллографическое разбиение E^3) должна определяться сохранением части параметров ТИ $M_9S_3(0,0)$ в определяющей его ТИ. В ТИ $M_9S_3(0,0)$ гексагонам оснований соответствуют знаки в блоке 9×9 , а трем парам параллельных квадратов – пары знаков из двух горизонтальных подблоков. Сборка $[4^6, 6^8]$ по параллельным квадратным граням приводит к стержню с осью симметрии, например, вдоль направления [100], который принадлежит слою (001). Очевидно, что получение 3-мерной структуры требует сборки по направлению, не лежащему в (001), например, по [111], а именно, по граням параллельных гексагонов. Таким образом, в трехмерной кристаллической структуре, которую генерирует М-эквивалентный $[4^6, 6^8]$ полиэдр, должны быть стержни, собираемые и по параллельным квадратным, и по параллельным гексагональным граням. За существование квадратных граней отвечают $2(3-k_i^j(f))$ горизонтальных ребер, следовательно, ТИ $M_9S_3(f,k)$ может определять стереоэдр при $k \leq 2$. Соответственно тетракадекаэдр (рис.6.13a), который не является стереоэдром, определяется $TIM_9S_3(0,3)$. В общем случае, развивающийся аппарат способен определять полиэдры, М-эквивалентные $[4^6, 6^8]$ и не являющиеся стереоэдрами [285].

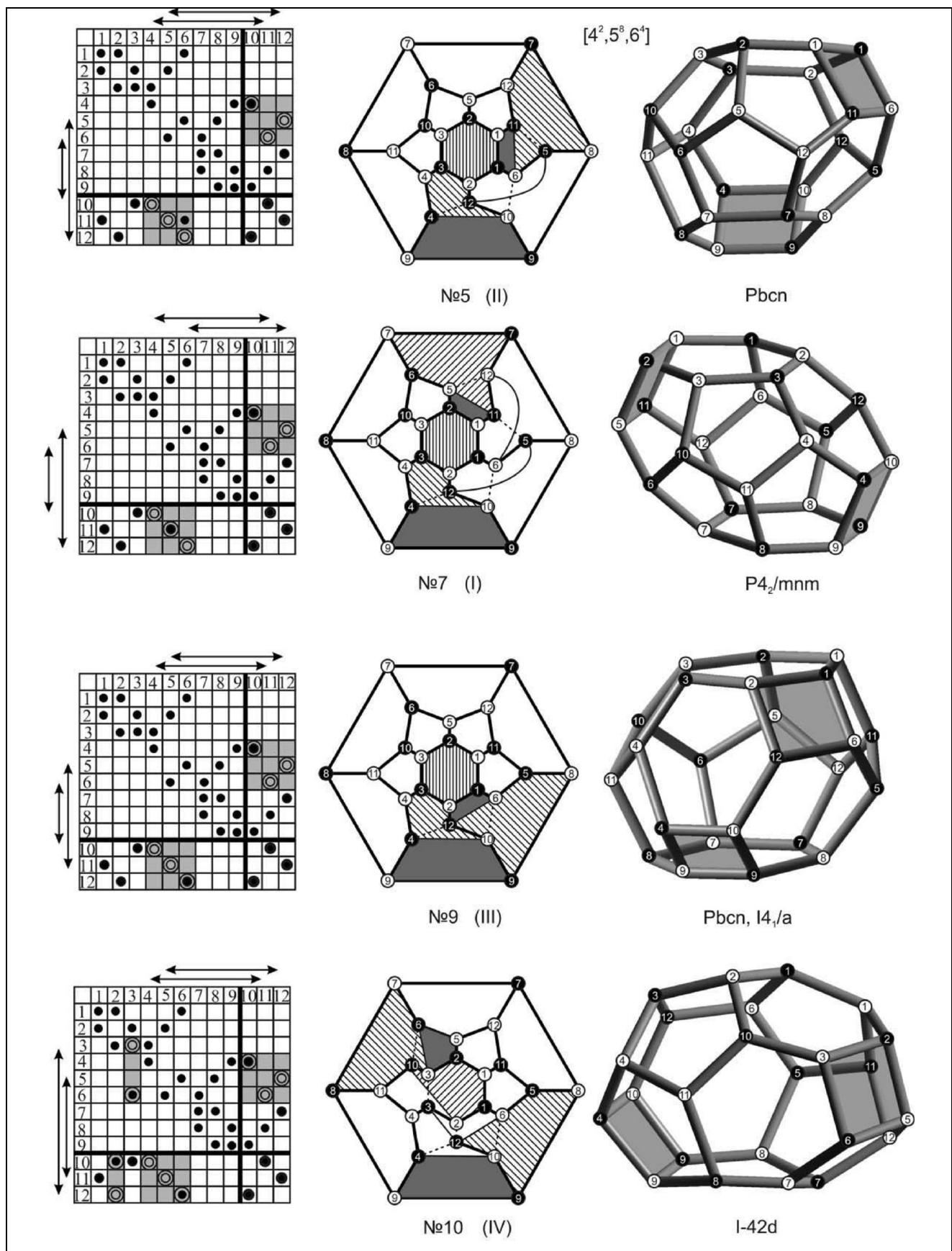


Рис.6.12. Таблицы инцидентности (ТИ), определяемые ими диаграммы Шлегеля, которые определяют графы стереоэдров [4², 5⁸, 6⁴]. Обозначения те же, что и на рис.6.11.

Условия $f = 1$, $k = 3$, $\delta = 0$ задают ТИ, в которой нет запрещенных в проективной геометрии прямоугольников из знаков инцидентности. Последнее означает, что определяемый такой ТИ граф $[6^{12}]$ может быть равнореберным в E^3 только при отбрасывании определенного числа троек ребер. Действительно, если считать, что отбрасываемым в малом диагональном блоке шести знакам соответствуют гипотетические ребра, то граф $\{[6^{12}]\}^6$ представляет собой граф 24-вершинного (30-реберного) стереоэдра кристаллического льда (рис.6.13 \bar{b}), определяемого ТИМ₉S₃(1,3).

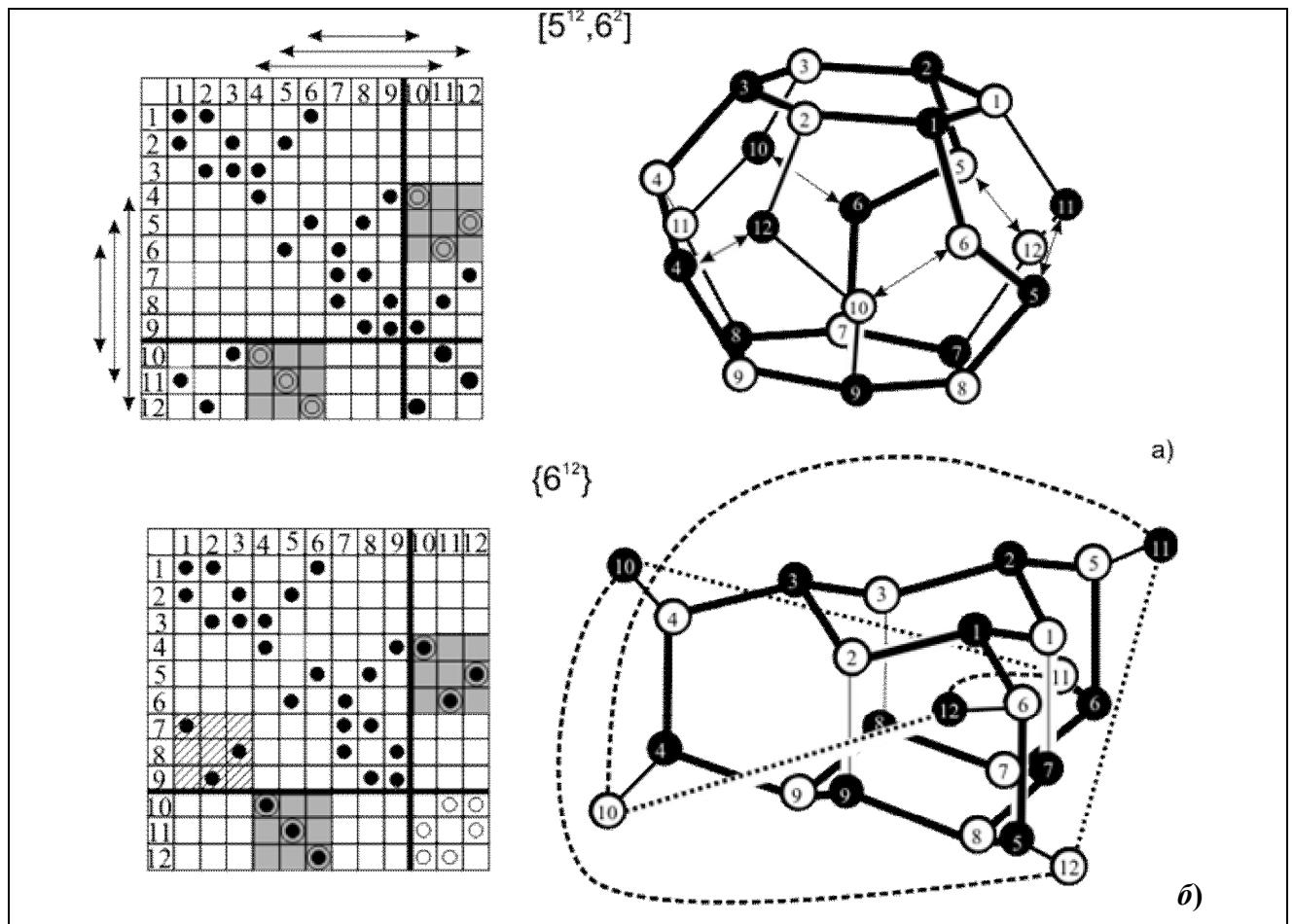


Рис.6.13.

- (а) ТИ графа тетракадекаэдра, в котором ребра между вершинами одного цвета обозначены стрелками.
- (б) ТИ кластера льда, чьи гипотетические ребра (пунктир) представлены в ТИ пустыми кружками. Без заштрихованного подблока блоки 9×9 в ТИ (а) и (б) совпадают и определяют 18-вершинный подграф, показанные жирными линиями.

В соотношениях (6.13), (6.14), лежащих в основе полученных результатов, к 12-ти вершинам икосаэдра добавлялись 20 вершин дуального ему додекаэдра, из которых затем отбрасывались 8 вершин куба. Очевидно, что снятие вырождения возможно еще только по

одному варианту: к 12-ти вершинам икосаэдра добавляются 8 вершин куба из дуального ему додекаэдра. Подобное объединение топологически-эквивалентно кубу с центризованными ребрами, которое Т-эквивалентно додекаэдру. Граф додекаэдра $[4^0, 5^{12}, 6^0]$ определяется ТИ 10×10 подконфигурации конфигурации Дезарга 10_3 [21, 33]. В [62] была определена и ТИ 10×10 другой подконфигурации конфигурации 10_3 , которая содержит 24 знака инцидентности и определяет «малый» додекаэдр $[4^3, 5^6, 6^3]$ (рис.6.14a).

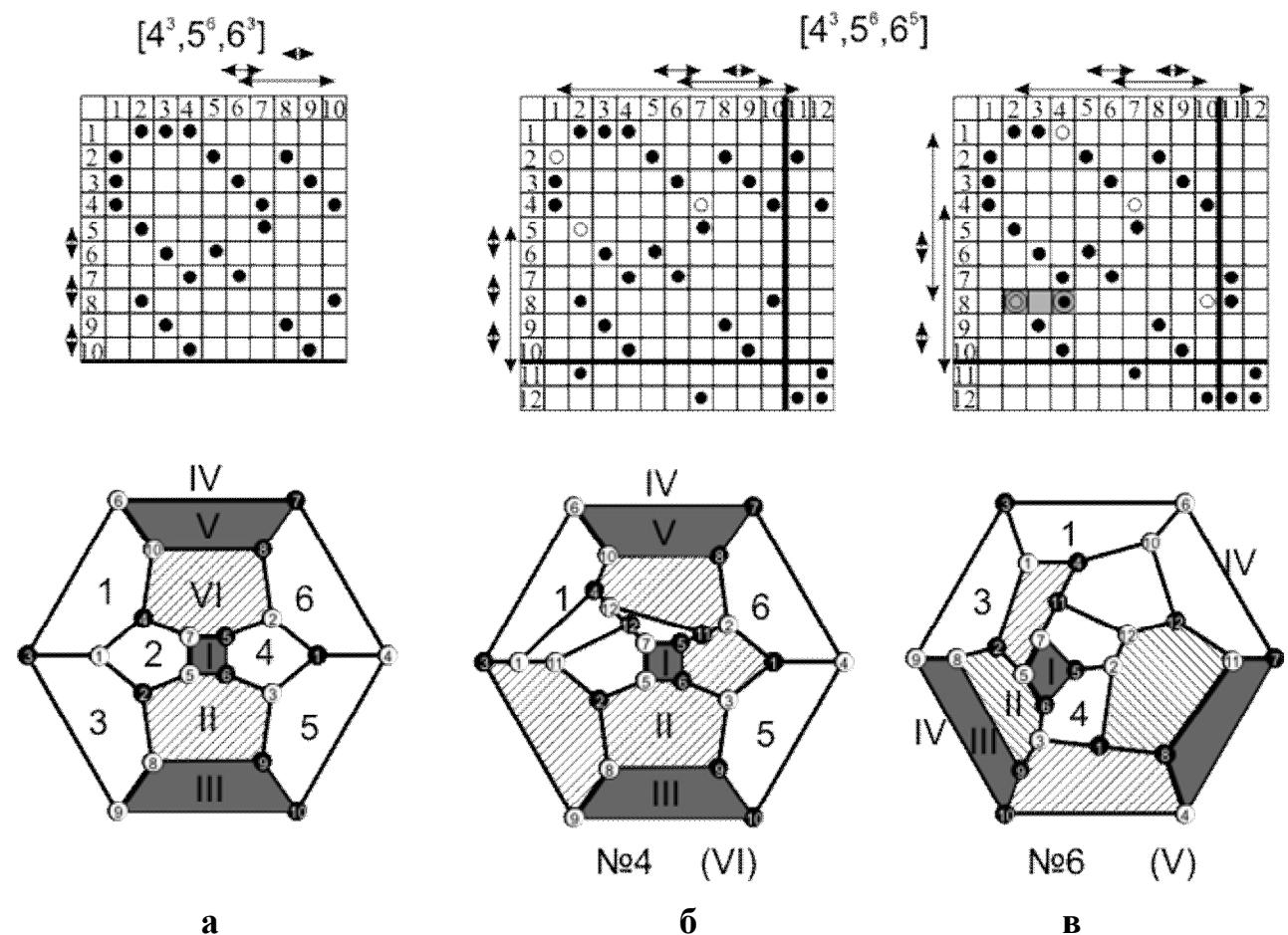


Рис.6.14. а) ТИ подконфигурации Дезарга 10_3 и диаграммы Шлегеля, определяющие малый додекаэдр $[4^3, 5^6, 6^3]$, чья тройная ось проходит через белую и черную вершины 1. Римскими цифрами обозначен экваториальный пояс из квадратов и гексагонов; тройки пентагонов вокруг тройной оси обозначены арабскими цифрами.

(б), (в) ТИ и диаграммы Шлегеля, определяющие стереоэдры № 4 и №6 [284, 285]. Блоки 10×10 отличаются от блока в (а) отсутствием 3 символов, показанных пустыми кружками. В ТИ (в) светло-серая полоска показывает сдвиг символа по сравнению с ТИ (б).

Аналогично подробно рассмотренному случаю ТИ $M_9S_3(f,k)$, можно показать, что блок 10×10 ТИ $M_{10}S_2(f,k)$ вкладывается в ТИ 10_3 , а строение всей ТИ определяется соотношением (6.13), при $f=0$ и несовместимым с M_9 значением $k(0) = 4$. Определяемый ТИ $M_{10}S_2(0,4)$ простой 24-вершинный полиэдр $[4^3, 5^6, 6^5]$ представляет собой стереоэдр №4 (рис.6.14б). Как и при построении стереоэдра №10 по ТИ стереоэдра №9, стереоэдр №6 может быть построен по ТИ $M_{10}^0S_2(0,4)$, определяющей полиэдр $[4^3, 5^6, 6^5]^0$ (рис.6.14в).

Конфигурация 8_3 – единственная, подтаблица 8×8 ее ТИ содержит 21 знак и определяет 16-вершинный 7-гранный равнореберный полиэдр $2Z8$ с неплоскими гексагональными гранями [33], который Т-эквивалентен кубу. Граф $2Z8$ определяется условием минимальности числа дополнительных вершин и ребер, которые трансформируют регулярное разбиение сферы на 6 квадратов (куб) в нерегулярное на 7 гексагонов. Граф $2Z8$ вкладывается в граф политопа $[4,3,3]$, группа симметрии которого порядка $2^4(4!)$ вкладывается в группу $M_8 \cdot S_4$. При этом, Т-процесс, заключающийся в отбрасывании одного ребра и добавлении четырех, приводит к простому 10-граннику $[(4^2)^2, 4^1; 5^2, 6^3]$, в котором 2 пары 4-угольников имеют общее ребро (рис.6.15а). Можно показать, что расширение подтаблицы 8×8 , определяющей $[(4^2)^2, 4^1; 5^2, 6^3]$ до ТИ $M_8S_4(-1,2)$, соответствует Т-процессам, которые задают простые 24-вершинные 14-гранники, содержащие изолированные 4-угольники. Таким образом, ТИ $M_8S_4(-1,2)$ определяет стереоэдр №4 (рис.6.15б). Аналогично, может быть построена ТИ $M_8^0S_4(-1,2)$, сводящая стереоэдр №6 к полиэдру $[4^3, 5^6, 6^5]^0$ (рис.6.15с).

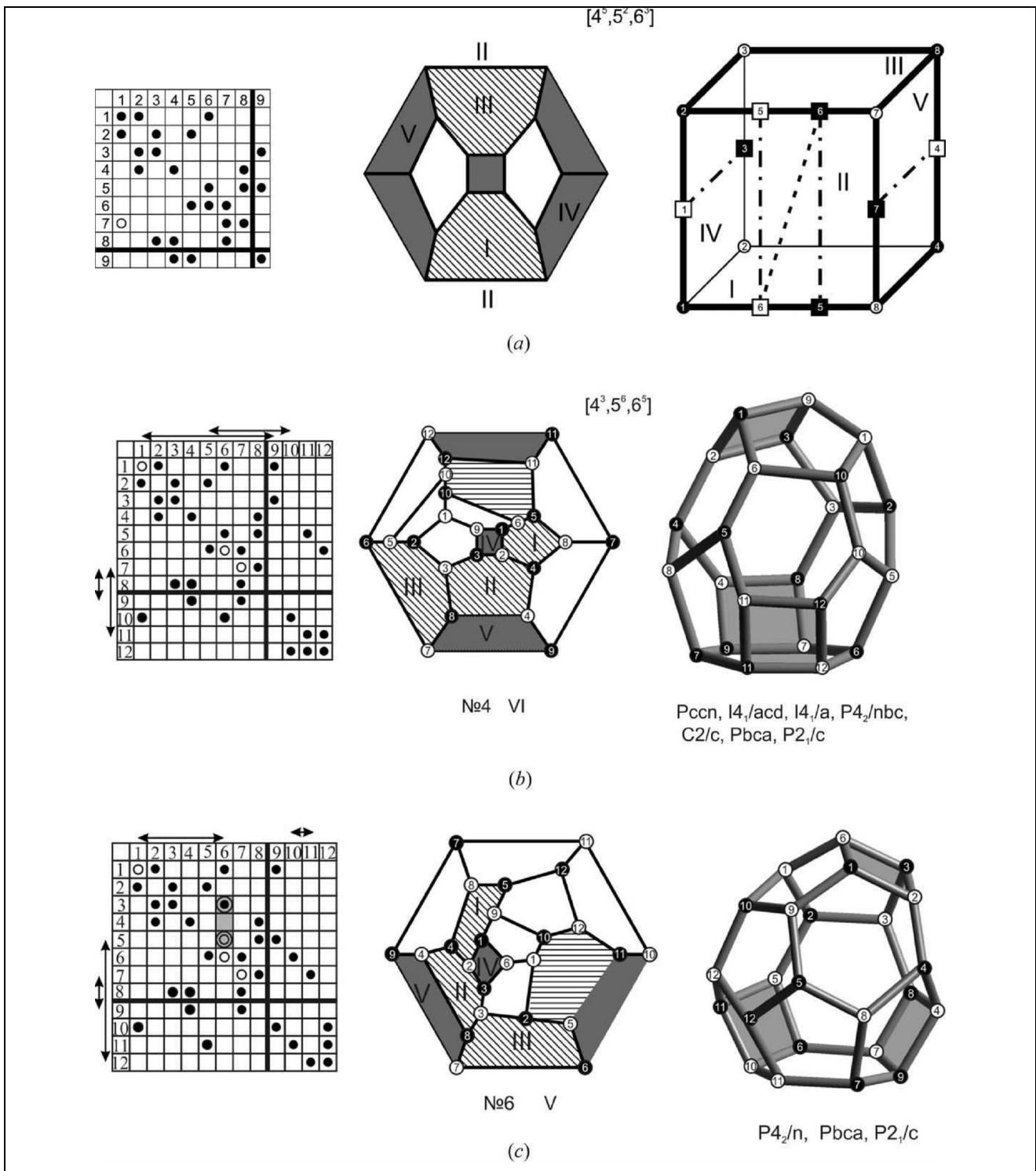


Рис.6.15.

(а) Блок 8×8 ТИ конфигурации $(9_3)_2$ определяет деление куба на 7 гексагонов при декорировании его ребер квадратными вершинами и разделении грани пунктирным ребром. Отбросив это ребро и проведя штрих-пунктирные ребра получим полиэдр $[4^5, 5^2, 6^3]$, на чьей диаграмме Шлегеля 4 и 6 –угольники отмечены римскими цифрами.
 (б), (с) Полиэдры $[4^3, 5^6, 6^5]$ определяются сравнением блоков 8×8 в соответствующих ТИ.

6.3.3. Простые 24-вершинные 14-гранные полиэдры, не являющиеся стереоэдрами в газогидратах (клатратах)

Появление работы [285] сделало актуальным вопрос о возможности априорного определения ТИ простого 24-вершинного 14-гранного полиэдра с одной 4-угольной, десятью 5-угольными и тремя 6-угольными гранями. Хотя данный полиэдр и не является стереоэдром, он может быть полиэдром-полостью в газогидратах.

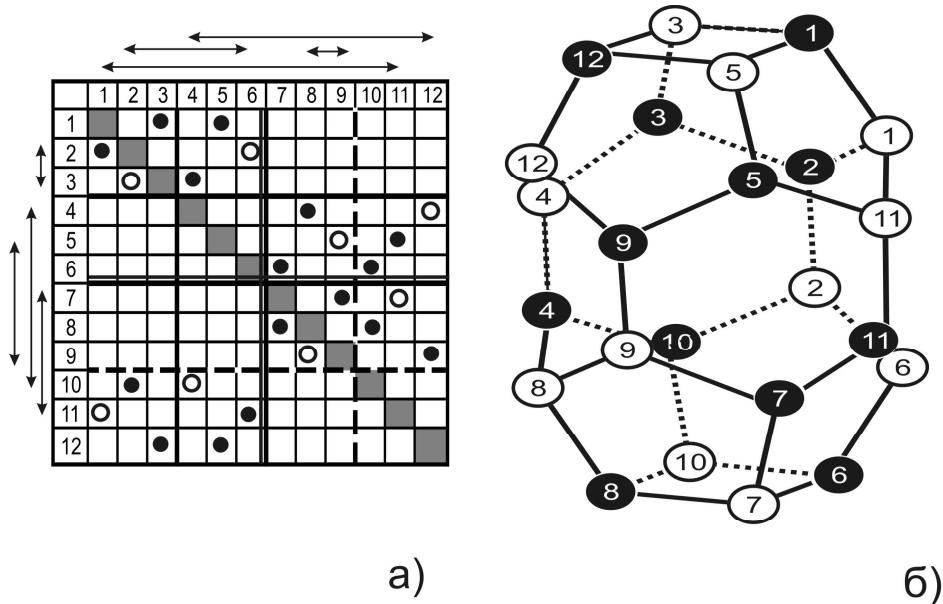


Рис.6.16. Таблица инцидентности и граф полиэдра $[4^2, 5^8, 6^4]$, который не является стереоэдром. Обозначения те же, что и на рис.6.15.

Решение этой задачи потребовало использования того факта, что симметрия системы E_8 (одной из основных конструкций развивающегося аппарата) задается определенным блоковым дизайном или t - (v, k, λ) -схемой. Напомним, что по определению t - (v, k, λ) -схема – это множество из v элементов, разбитое на b подмножеств (блоков) из k элементов так, что любые t элементов содержатся в λ блоках. При $t = 1$ имеем $bk = vr$, так что каждый элемент принадлежит r блокам [21]. Примером 2 - $(11, 5, 2)$ –схемы является биплоскость, которую образуют выделенные жирным шрифтом пятерки чисел в первом столбце таблицы. Действительно, $v = 11$ – это 11 чисел от 0 до 10, причем 10 обозначено X; блок состоит из $k=5$ чисел. Какие бы 2 числа мы не взяли, найдутся только два блока из $b = 11$, которые их содержат [145]. Например, 5 и 7 содержатся только в 3-м и 5-м блоках и т.д. Системой Штейнера $S(t, k, v)$ называется t - $(v, k, 1)$ -схема, система $S(4, 5, 11)$, состоящая из 66 блоков, приведена в Таблице 6.1 [145]. Каждое число входит в $bk/v=r=30$ блоков. Система $S(4, 5, 11)$ однозначно определяет систему $S(5, 6, 12)$, группой автоморфизмов которой является M_{12} [16, 145].

Таблица.6.1 Система Штейнера $S(4,5,11)$ или 4-(11,5,1)-схема [145].

13459	07293	03618	0412X	06X59	05784
2456X	183X4	14729	15230	1706X	16895
35670	29405	2583X	26341	28170	279X6
46781	3X516	36940	37452	39281	38X07
57892	40627	47X51	48563	4X392	49018
689X3	51738	58062	59674	504X3	5X129
79X04	62849	69173	6X785	61503	6023X
8X015	7395X	7X284	70896	72615	71340
90126	84X60	80395	819X7	83726	82451
X1237	95071	914X6	92X08	94837	93562
02348	X6182	X2507	X3019	X5948	X4673

В используемой нами ТИ12₃(M_n·S_{12-n}) неявно задействована конечная проективная плоскость PG(2,q), которая является системой Штейнера $S(t,k,v) = S(2, q+1, q^2+q+1)$. Действительно, для PG(2,q) число точек v (столбцов в таблице инцидентности) и прямых b (блоков, то есть строк в ТИ) равно $v = b = q^2+q+1$; число k точек на прямой (число точек в блоке) и число r прямых, проходящих через одну точку (каждая точка принадлежит r прямым) равно $k = r = q+1$. Любые две точки ($t = 2$) принадлежат одной ($\lambda = 1$) прямой, а общее число знаков инцидентности в ТИ PG(2,q) равно $b \cdot k = v \cdot r = (q^2+q+1)(q+1)$. Для любого целого t ($2 \leq t \leq t'$) каждая t-схема определяет и t'-схему, для которой $t' = t-1$, $\lambda' = \lambda(v+1-t)/k+1-t$. Это позволяет по известной PG(2,q) строить более общие t - (v, k, λ) схемы [21].

Например, при $t = 3$, $v = q^2+1$, $k = q+1$ система Штейнера $S(3, q+1, q^2+1)$ определяет плоскость Мёбиуса (инверсную плоскость), которая получается из евклидовой плоскости присоединением единственной идеальной точки. Данная точка считается принадлежащей всем

прямым плоскости, а такое присоединение уравнивает на плоскости прямые и окружности, называемые циклами. Подмножество из q^2+1 точек проективного пространства порядка q , обладающего тем свойством, что никакие три точки в нем не коллинеарны является овалоидом. Использование овалоида над координатным полем $GF(2)$ позволяет получать точки конечной аффинной плоскости соответствующего порядка, которую, в свою очередь, можно соотнести с корневой системой соответствующей полупростой алгебры

Для определяемой $S(3,4,10)$ плоскости Мебиуса (при $q = 3$) справедливы положения:

- 1) Число всех точек плоскости $q^2+1=10$;
- 2) Число всех циклов $q (q^2+1) = 30$;
- 3) Каждый цикл инцидентен $q+1 = 4$ точкам; (6.15)
- 4) Каждая точка инцидентна $q(q+1) = 12$ циклам;
- 5) Каждые два столбца пересекают в точности $q+1 = 4$ строки.

Удовлетворяющая условиям (6.15) таблица инцидентности (рис.6.17 a) состоит из 10 столбцов и 30 строк. В работе [37] показано, что столбец в ТИ (рис.6.17 a) можно считать центром кубооктаэдра, а каждый из 12 знаков инцидентности данного столбца – вершиной этого кубооктаэдра. При такой трактовке ТИ $S(3,4,10)$ определяет объединение по квадратным граням 10 кубооктаэдров, в котором 6 кубооктаэдров стоят на всех квадратных гранях центрального, тем самым выделяя его (рис.6.17 b, c). Центр такого кубооктаэдра соответствует идеальной точке P_0 плоскости Мебиуса. Изображённый на рис.6.17 b, c кластер обладает симметрией D_3 и вкладывается в ГЦК-решётку [37]. Таким образом, если рассмотренные ТИ $PG(2,q) = S(2, q+1, q^2+q+1)$, $q = 2, 3, 4$ определяли графы особых кластеров тетракоординированных (алмазоподобных) структур, то подтаблица ТИ $S(3, q+1, q^2+1)$, $q = 3$ определяет граф особого кластера тетраэдрической (металлической) структуры.

Каждый блок B в $t-(v,k,\lambda)$ -схеме может быть представлен своим характеристическим вектором (c_1, \dots, c_v) , таким, что $c_i=1$, если $i \in B$, и $c_i=0$, если $i \notin B$. Таким образом, t -схема является и двоичный кодом, в каждом слове которого из v символов находятся k ненулевых. Группа $PSL_2(11)$, представляет собой группу автоморфизмов биплоскости [145], поэтому решение данной задачи потребовало трактовки группы M_{12} и как группы автоморфизмов троичного кода Голея G_{12} . Этот код (1.15) определяется добавлением проверки на четность к коду G_{11} , состоящему из 729 наборов (слов), в которых по 11 позициям размещены 1, -1 и 0. Если 0 сопоставляется пустая клетка в ТИ, 1 - знак инцидентности, то -1 сопоставляется пустая клетка ТИ, в которую может быть перенесен знак инцидентности.

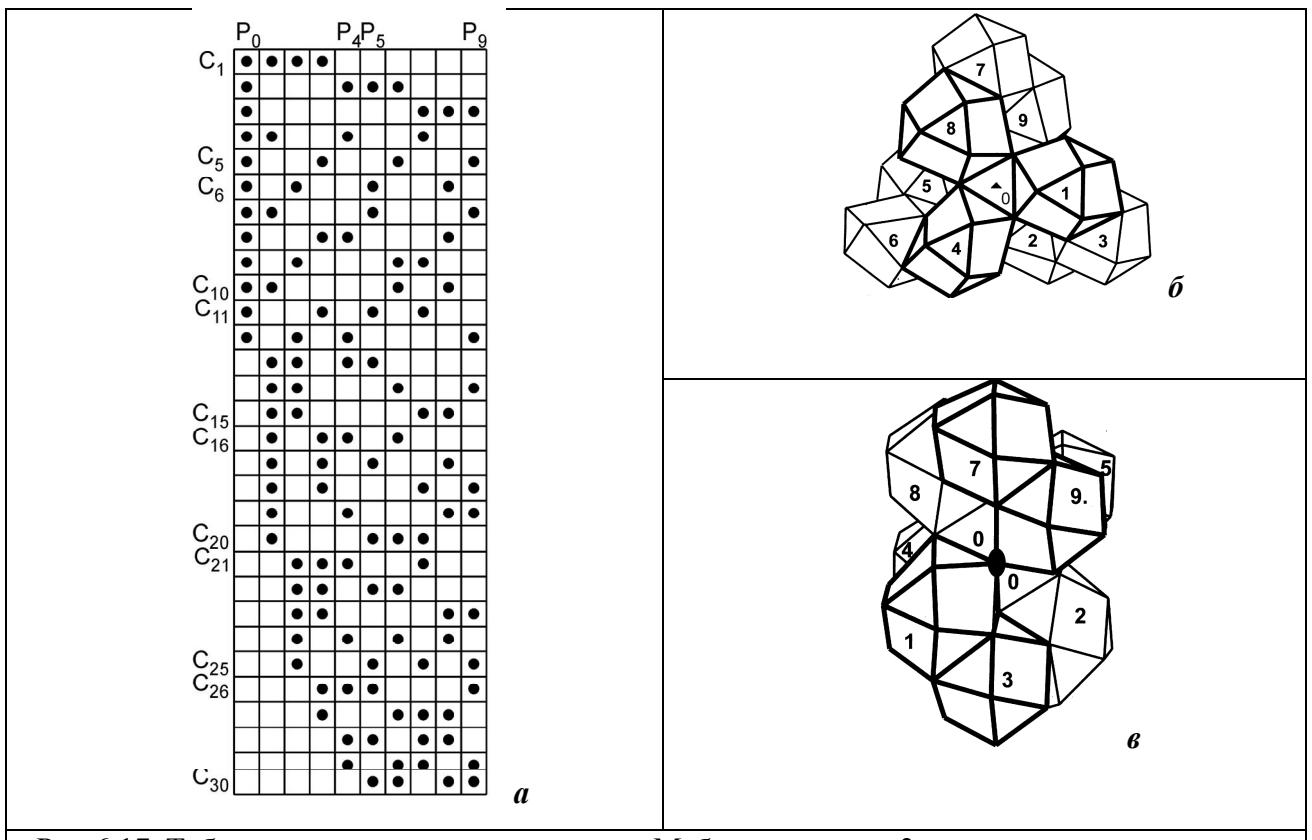


Рис.6.17. Таблица инцидентности плоскости Мёбиуса порядка 3 и определяемое ею объединение 9 кубооктаэдров вокруг центрального.

(*a*) Таблица инцидентности плоскости Мёбиуса порядка 3 как 3-(10,4,1)-схема [21].

(*б*), (*в*) Определяемое таблицей (*a*) объединение по квадратным граням 10 кубооктаэдров в ГЦК – решётки. Тройная (*б*) и двойная (*в*) оси кластера совпадают с тройной и двойными осями нулевого кубооктаэдра.

Переход от $t-(v,k,\lambda)$ -схемы к определяемому ею коду существенно расширяет симметрийные возможности определения ТИ графов. Действительно, система $S(4,5,11)$ состоит из 66 блоков, а код G_{11} из 729 слов. Не вдаваясь в математические подробности, изложенные в [145], укажем, что соотношения (6.15) позволяют априори получать особые ТИ вида $TI_{12_3}(M_9 \cdot S_3)$, которые нельзя выделить только в рамках соотношений (6.13). По этому алгоритму может быть получена ТИ, определяющая граф 14-гранного полиэдра $[4^1, 5^{10}, 6^3]$, который получается из (рис.6.16б) по алгоритму: $[4^2, 5^8, 6^4] \leftrightarrow [4^1, (4 \cup 6), 5^8, 6^3] \leftrightarrow [4^1, 5^{10}, 6^3]$.

6.4. Закономерности полиэдральной сборки упорядоченной тетракоординированной структуры газогидрата и локальные фазовые превращения

В [47] была рассмотрена симметрийная модель выхода молекулы-гостя из додекаэдрического водного каркаса газогидрата, определяемая трансформацией $\{5,3\} \rightarrow \{10_3\}^{6(1)}$, которая реализуется при разрыве 9 связей в $\{5,3\}$ и раскручивании

(посредством шарнирного прокручивания связей) оставшегося каркаса (до установления 3 новых связей такой же длины) в кластер алмазоподобного льда. Соотношения (6.16) позволяют получить более общую и детальную симметрийную модель этого процесса:

$$\begin{array}{ccc} \{5,3\} & & \{10_3\}^{6(1)} \\ \downarrow & & \uparrow \\ \{10_3\}_6^6 & \rightarrow & \{10_3^3\}^6 \rightarrow \{10_3^4\}^6 \end{array}, \quad (6.16)$$

в которой додекаэдр или полиэдр-полость $[4^3, 5^6, 6^3]$ трансформируются в промежуточный "полиэдр" $\{10_3^3\}^6$ с последующей раскруткой до $\{10_3^3\}^{6(1)}$ или сжатием до $\{10_3^4\}^6$. Отметим, что трансформация $\{5,3\} \rightarrow \{10_3\}^{6(1)}$ соответствует коллапсу углеродного додекаэдра (фуллерена C_{20}) в алмазную структуру [286]. Структурный переход между фазами высокого давления кремния BC-8 \rightarrow R8 определяется трансформацией 14-вершинников [287], аналогичной $\{10_3^3\}^6 \rightarrow \{10_3^4\}^6$.

Определяемые подконфигурациями PG(2,3) тригональные 20-вершинники являются и особыми кластерами высокосимметричных тетракоординированных структур: $\{5,3\}$ – ячейка политопа $\{5,3,3\}$ (4-мерного аналога додекаэдра [8, 13]), $\{10_3^4\}^6$ – "реберная" фигура политопа $\{240\}$. С учетом этого возможно обобщение :

$$\begin{array}{ccccccccc} \{13_4\} & \supset & \{10_3^4\}^6 & \supset & \{10_3^3\}^6 & \supset & \{10_3\}^{6(1)} & \subset & D_3^+ \\ & & \uparrow & & \uparrow\downarrow & & \Updownarrow & & \\ \{240\} & & \{10_3\}_6^6 & \rightleftharpoons & \{10_3\}_{6(1)}^{6(2)} & \leftrightarrow & \{5,3\} & \subset & \{5,3,3\} \end{array}, \quad (6.17)$$

где $\{13_4\}$ – граф инцидентности PG(2,3), D_3^+ – структура алмаза, как бихроматическое объединение двух ГЦК-решеток, каждая из которых совпадает с решеткой корней D_3 [16].

Тройная ось позволяет 20-вершинникам из (6.17) объединяться в стержневые подструктуры, между которыми возможны взаимные трансформации по механизму (6.17). Так, например, стержни (вдоль направления [111]) в алмазоподобном льде и кубическом газогидрате могут трансформироваться друг в друга при соответствующих трансформациях образующих их кластеров $\{10_3\}^{6(1)}$ и $\{5,3\}$ (рис.6.6). Взаимные трансформации стержней из кластеров $\{10_3\}^{6(1)}$ и $\{10_3^4\}^6$, осуществляемые посредством шарнирного прокручивания связей во всем стержне, подробно рассмотрены в [90]. Таким образом, в (6.17) символ кластера можно рассматривать и как символ стержня из этих кластеров, которому, в общем случае, соответствует структурная реализация определенной конструкции алгебраической геометрии [47].

Одно из основных преимуществ данной модели фазовых переходов заключается в возможности установления минимального числа водородных связей, которые необходимо перебросить (или разорвать) для реализации симметрийно-возможных трансформаций. Симметрийные соотношения схемы (6.17) могут использоваться как необходимые условия при соответствующих расчетах структур газогидратов и фазовых переходов.

6.5. Решетка E_8 , политопы и линейные подструктуры газогидратов с некристаллографической симметрией

В работе [63] впервые был выделен особый класс геликоидов – геликоидов Госсета, винтовые оси которых задают вращение на угол $(360^\circ/L) \cdot d$ и определяются соотношением:

$$L/d = \frac{8}{\gamma_1 \gamma_2} \cdot \frac{I_n}{I_s} \cdot \frac{m_{js} + 1}{m_{js}} = \frac{8I_n}{\gamma_1 k_{js}} \cdot \frac{1}{\gamma_2 m_{js}}, \quad (6.18)$$

в котором $I_n, I_s = k_{js}(m_{js}+1)$ - инварианты, m_{js} - показатели решетки корней полупростой группы Ли; $\gamma_1, \gamma_2 = 1$ или 2 в зависимости от одно- или двулистности соответствующего отображения. Соотношение (6.18) задает (сохраняющее локальную минимальность поверхности) отображение "на цилиндр" алгебраического политопа, который определяется $8I_n$ векторами системы корней E_8 [16]. При этом на одну из k_{js} сфер в цилиндре приходится $N = 8I_n/\gamma_1 k_{js}$ вершин политопа, а на экватор – N/γ_2 вершин, из которых $m_{js}+1$ соответствует слою в накрытии (из I_s вершин) над букетом окружности и сферы [15, 63]. Отображение $N/\lambda, \lambda = 1, 2 \dots$ вершин в вершины полиэдра, две грани которого параллельны плоскости экватора и совмещаются хотя бы одним геликоидом Госсета, определяет стержень Госсета из k_{js} конгруэнтных полиэдров.

Стержню Госсета соответствует редуктивная (алгебраическая) группа и ее параболические подгруппы, которые позволяют построить проективное многообразие [30, 37]. При $N=2\lambda L$ такое многообразие может быть сведено к самодуальной конфигурации L_3 , содержащей особую подконфигурацию $(p^r)_3, p^r+3=L$, p – простое число, $r=1, 2, \dots$. Трехкоординированный бихроматический граф инцидентности самодуальной конфигурации L_3 обладает обхватом (циклом минимальной длины), равным 6, и содержит подграф с группой симметрии $G((p^r)_3)$ порядка $2^s \cdot 3 \cdot p^r$, где s – регулярность графа [147]. Бихроматичность графа означает равное количество "черных" и "белых" вершин, соединенных ребрами, и соответствует разделению $8I_n$ векторов системы E_8 на 2

подсистемы. Множество двуцветных пар вершин соотносится с множеством инволюций (преобразований порядка 2), которое порождает группу Вейля, связанную с редуктивной группой [30, 37].

Геликоиду Госсета (6.18) соответствует обычный ($d = 1$) или звездчатый ($1 < d < L/2$) полигон [63] с циклическим графом $\{L/d\}$ и циклической группой C_L порядка L . Согласно [147], при $L = 5, 8, 10, 12$ возможен трехкоординированный бихроматический граф, представляющий собой объединение $\{L\}$ с единственным звездчатым графом $\{L/d\}$. Сопоставление графам $\{L\}$ и $\{L/d\}$ геликоидов Госсета позволяет охарактеризовать стержень Госсета графом инцидентности L_3 :

$$\left\{ \frac{p^r + 3}{m_{js}} \right\} + \left\{ \frac{2\lambda \cdot p^r + 3}{\gamma_2 \cdot m'_{js}} \right\} = \{L\} + \left\{ \frac{L}{d} \right\}. \quad (6.19)$$

Трехкоординированный $2L$ -вершинный бихроматический граф (6.19) однозначно определяется своей $L \times L$ таблицей инцидентности (ТИ), строка и столбец которой соответствуют черной и белой вершинам графа, а знак инцидентности (на пересечении строки и столбца) соответствует соединяющему их ребру. Отbrasывание из ТИ одних знаков инцидентности и введение других позволяет перейти к таблицам ТИ_f, $f = 1, 2, \dots$, которые определяют графы реализующихся в E^3 равнореберных $2L$ -вершинных (кластеров) полиэдров [33, 62]. При этом ТИ_f содержат $p^r \times p^r$ подтаблицу ТИ_p, которая определяет $2p^r$ -вершинный граф с максимально возможным числом 2-координированных вершин. Иными словами, граф (6.19) задает проективный класс стержня Госсета (отображенного на перпендикулярную оси плоскость), а ТИ_f определяют равновершинные (но с меньшим числом ребер) графы полиэдров, которые генерируют стержни Госсета, входящие в данный класс. Графы таких стержней могут быть представлены в виде:

$$\mu\{L/\mu d\} + \mu'\{L/\mu'd'\}, \quad (6.20)$$

где μ – делитель L , символ $\mu\{L/\mu d\}$ обозначает объединение μ циклических графов $\{L/\mu d\}$.

Структуру «базисных» газогидратов I, II определяют стержни из тетракадекаэдров $\{5^{12}, 6^2\}$ и додекаэдров $\{5^{12}\}$, где $\{5^{12}, 6^2\}$ обозначает полигон с 12 пентагональными и 2 гексагональными гранями [281, 284]. Стержень из 24-вершинных тетракадекаэдров (рис. 6.18а) обладает винтовыми осями 12_6 , $12_6 \cdot 3^{-1}$ и $12_6 \cdot 3$ (где 3 – поворот на 120°), которые определяются по (6.18) как геликоиды Госсета $12/1$, $12/7$ и $12/5$ при $I_n = 12, 18, 24$; $I_s = 24 = 2(11+1) = 3(7+1) = 4(5+1)$. Эквивалентность хиральных геликоидов $12/5$ и $12/7$ позволяет определить граф (6.19) для данного стержня Госсета:

$$\left\{ \frac{3^2+3}{11} \right\} + \left\{ \frac{3^2+3}{5} \right\} = \{12\} + \left\{ \frac{12}{5} \right\}, \quad (6.21)$$

который представляет собой граф инцидентности самодуальной конфигурации 12_3 [21, 147]. В силу (6.21), ТИ 12_3 можно рассматривать как «расширение» ТИ $(9_3)_2^3$, – ТИ самодуальной конфигурации $(9_3)_2$ без трех знаков инцидентности: 4'5, 5'4 и 6'6 (цифры со штрихами нумеруют строки, без штрихов – столбцы). Выбор конфигурации трех вписанных друг в друга треугольников $(9_3)_2$ определяется ее соответствием проекции стержня на плоскость [21, 33]. Расширение $(9_3)_2^3$ до $12_3/(9_3)_2^3$ определяется запретом на знаки инцидентности во всех четырех клетках, стоящих на пересечении каких-либо двух строк и двух столбцов ТИ конечной проективной плоскости [21, с.14]. Поэтому каждый из отбрасываемых в ТИ $(9_3)_2$ знаков «порождает» 3 знака в ТИ $12_3/(9_3)_2^3$, которые располагаются по вершинам прямоугольника вне квадрата 9×9 .

Таблица ТИ₁=ТИ $12_3/(9_3)_2^3$ определяет 24-вершинный кластер обычного (гексагонального) льда (рис.6.13б), который принадлежит стержням с геликоидами Госсета вида $6/1 = 6_3$ и $3/1 = 3$ (рис.6.18). Указанные геликоиды определяются условиями $I_n = 12$, $I_s = 24 = 4(5+1) = 4(4+2) = 8(2+1)$, а соотношение (6.20) реализуется в виде $2(2\{3\})+2\cdot3\cdot\{2\}$. Символ $2(2\{3\})$ означает, что каждый из двух поперечных гексациклов разбит на 2 тройки (вершины одной тройки верхнего гексацикла соединены с вершинами тройки нижнего гексацикла); символ $2\cdot3\cdot\{2\}$ означает деление вершин додекацикла на две тройки пар вершин.

Определяемый ТИ_p 18-вершинный граф задается ТИ $(9_3)_2^{3+3}$ (т.е., ТИ $(9_3)_2^3$ без знаков инцидентности 7'3, 8'3 и 9'2), ее расширение до ТИ₂=ТИ $12_3/(9_3)_2^{3+3}$ задает граф усеченного октаэдра $\{4^6,6^8\}$ из кубической структуры содалита (рис.6.9). Соотношение (6.20) для стержня Госсета из $\{4^6,6^8\}$ (рис.6.18) реализуется в виде: $2(3\cdot\{2\})+2\cdot3\cdot\{2\}$. Боковыми «гранями» $\{4^6,6^8\}$ можно считать шесть 8-угольников, образованных квадратами и гексагонами с общими ребрами: $\{4^6,6^8\} \rightarrow \{8^6,6^2\}$. Если такой 8-угольник общим ребром разделить на два (топологических) пентагона, получим топологический тетракадекаэдр $\{5^{12},6^2\}$, которому соответствует ТИ₃ = ТИ $12_3^*/(9_3)_2^{3+3}$ с заменой знаков инцидентности из «запрещенных» прямоугольников на стрелки, соответствующие ребрам между вершинами одного цвета (рис.6.13а).

Стержень из 20-вершинных додекаэдов (с общей пятерной осью) обладает винтовыми осями 10_5 и $10_5 \cdot 5$, которые определяются по (6.18) как геликоиды Госсета 10/1 и 10/3 при $I_n = 20$, $I_s = 8 = 4(1+1)$, $I_s = 14 = 2(6+1)$. Граф (6.19) для такого стержня:

$$\left\{ \frac{7+3}{1} \right\} + \left\{ 2 \cdot \frac{7+3}{6} \right\} = \{10\} + \left\{ \frac{10}{3} \right\} \quad (6.22)$$

представляет собой граф инцидентности конфигурации Дезарга 10_3 . Его ТИ можно рассматривать как расширение $\text{ТИ}_p = \text{ТИ}(7_3)^3$ - общей подтаблицы конфигураций Фано 7_3 и Дезарга 10_3 . Такая ТИ_p задает 14-вершинный граф невыпуклого параллелоэдра алмаза [33].

6.6. Модели фазового перехода газогидрат - лед

Тройная ось $\{5,3\}$ совпадает с осью b_1 политопа $\{5,3,3\}$, ячейкой которого является $\{5,3\}$, что определяет возможность взаимных трансформаций и для стержней из тетракоординированных кластеров, например, для стержней различных модификаций льда [9].

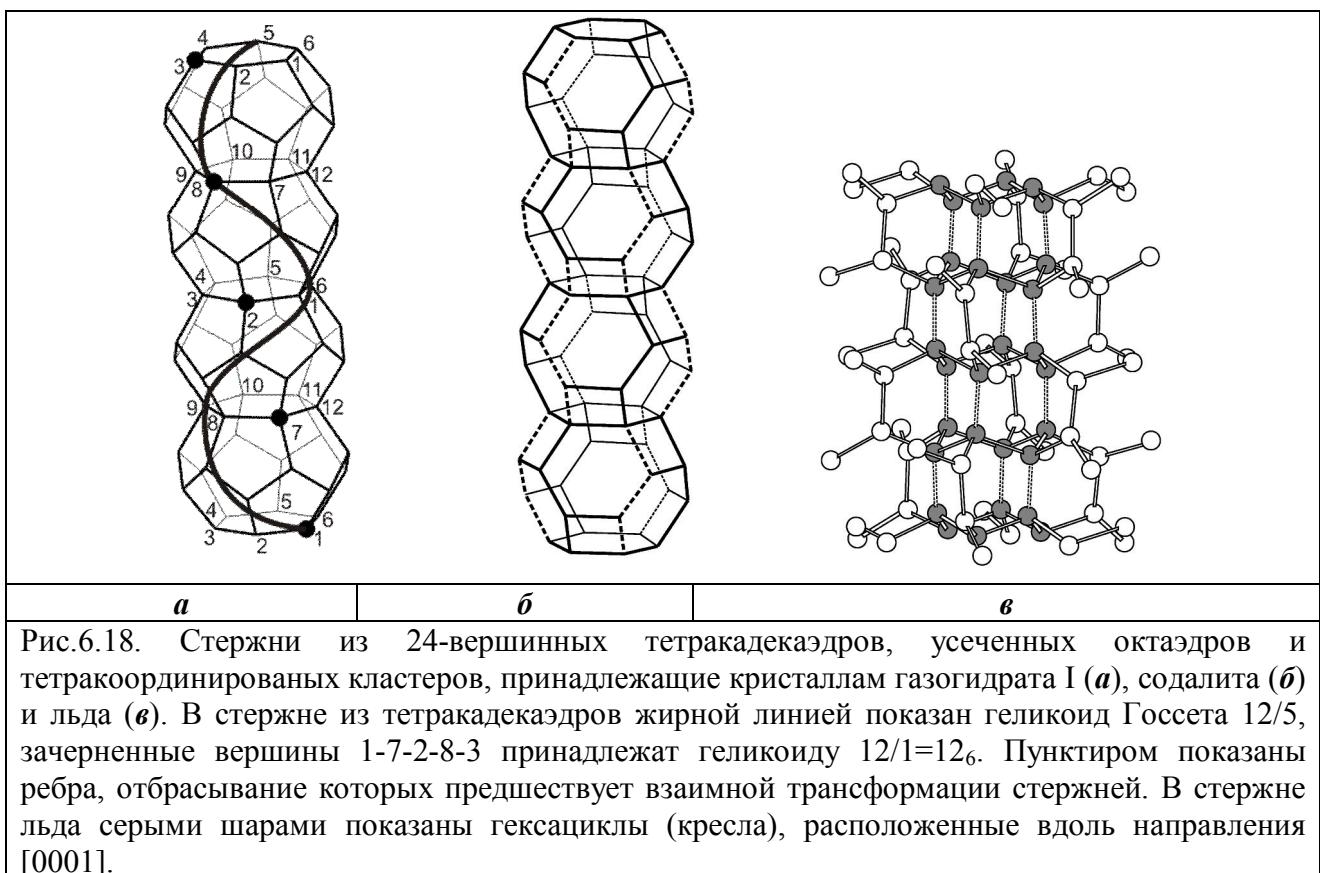
Возможность взаимных трансформаций стержней Госсета определяется условием:

$$C_{L/\mu} \subset G((p^r)_3), \quad (6.23)$$

где $C_{L/\mu}$ – группа геликоида Госсета стержня. Действительно, для рассматриваемых стержней Госсета (рис.6.18) $L = 12$, группа $G((p^r)_3) = G(9_3)$ имеет порядок $2^3 \cdot 3 \cdot 9 = 216$ и содержит подгруппу C_6 , определяющую винтовую ось b_3 геликоида Госсета. Примером невыполнения (6.23), обуславливающим запрет на трансформацию, является задаваемый (6.22) стержень, для которого в группе $G(7_3)$ порядка $2^4 \cdot 3 \cdot 7 = 336$ отсутствует подгруппа C_5 . В свою очередь, наличие в группе $G(7_3)$ подгруппы C_3 отображает возможность трансформирования додекаэдра в 20-вершинный кластер алмаза при сохранении общей тройной оси кластеров[33, 62].

Трансформация генерирующего стержень полиэдра реализуется перебросками ребер и однозначно определяется сопоставлением ТИ_f для исходного и конечного полиэдров. Например, знаки инцидентности в клетках $7'1$, $9'2$ и $8'3$ вместе с пустыми клетками $7'12$, $11'12$, $11'1$; $9'10$, $12'10$, $12'2$ и $8'11$, $10'11$, $10'3$ образуют прямоугольники в ТИ (рис.6.13б). Отбрасывание этих знаков позволяет ввести знаки в пустых вершинах соответствующих прямоугольников ТИ (рис.6.13а), что соответствует разрыву ребер $7'1$, $9'2$ и $8'3$ в графе кластера льда (рис.6.13б) и возникновению ребер $7'12$, $11'12$, $11'1$; $9'10$, $12'10$, $12'2$ и $8'11$, $10'11$, $10'3$. Требование равенства длин ребер в графике возникшего полиэдра определяет усеченный октаэдр. Ребра $4'10$, $5'12$, $6'11$ и $10'4$, $11'5$, $12'6$ находятся в "запрещенных" вершинах прямоугольников ТИ, что является основанием для их замены ребрами, соединяющими вершины одного цвета. Указанная замена обеспечивает переход к ТИ (рис.6.13а), определяющей график тетракадекаэдра.

Строение газогидратов рассматриваемого типа можно свести к трем уровням организации структуры: 1) полиэдра-полости, 2) стержня (геликоида) Госсета из полиэдральных полостей, 3) объединения стержней. Результаты [37, 63, 65] и настоящей работы позволяют утверждать, что структуры каждого уровня можно рассматривать как евклидовые реализации конструкций алгебраической геометрии. В рамках развивающегося подхода показана возможность самоорганизации упорядоченной некристаллической тетракоординированной структуры, каждая из вершин которой принадлежит одному из изолированных стержней Госсета [37]. Двумерной схемой такой модели может служить шахматная доска, все вершины которой охватываются изолированными белыми (черными) квадратами. Возможность аналогичной (полной или частичной) организации уровня 3) позволяет рассматривать трансформации стержней Госсета как структурную основу фазового превращения газогидрат–лед.



В частности, экспериментально наблюдаемое (но не имеющее структурной модели) фазовое превращение газогидрат I – гексагональный (обычный) лед [284] можно рассматривать как результат трансформации стержней из тетракадекаэдров в стержни из усеченных октаэдров с трансформацией последних в стержни льда (рис.6.18). При сохранении объема [281] трансформация {5¹², 6²} в {4⁶, 6⁸} происходит посредством образования "боковых" декациклов (один из них 1'23'44'99'85'6 (рис.6.13*а,б*)) и увеличения поверхностей, которые они ограничивают. Усеченный октаэдр играет роль интермедиата, и в

дальнейшем молекула-гость "выталкивается" из него через боковой декацикл для снижения интегральной энергии системы. Оставшийся пустым, усеченный октаэдр «схлопывается» в кластер льда, существенно уменьшая объем внутренней полости. В масштабе всего стержня его трансформации реализуются шарнирным прокручиванием цепочек водородных связей [47, 62].

Полученные результаты можно, в частности, рассматривать как симметрийную основу для молекулярно-динамического моделирования разложения газогидрата, в результате которого молекула газа покидает полиэдр-полость из молекул воды [177]. Например, для газогидрата I с метаном, занимающим додекаэдрические и тетракадекаэдрические пустоты, было установлено, что его фазовому переходу в лед (воду) предшествует процесс трансформации части тетракадекаэдров (рис.6.13*a*) в априори выведенные полиэдр-полости газогидратов. Для части тетракадекаэдров зафиксирован и процесс образования декациклов, через которые молекулы метана уже могут покинуть тетракадекаэдры (рис.6.19).

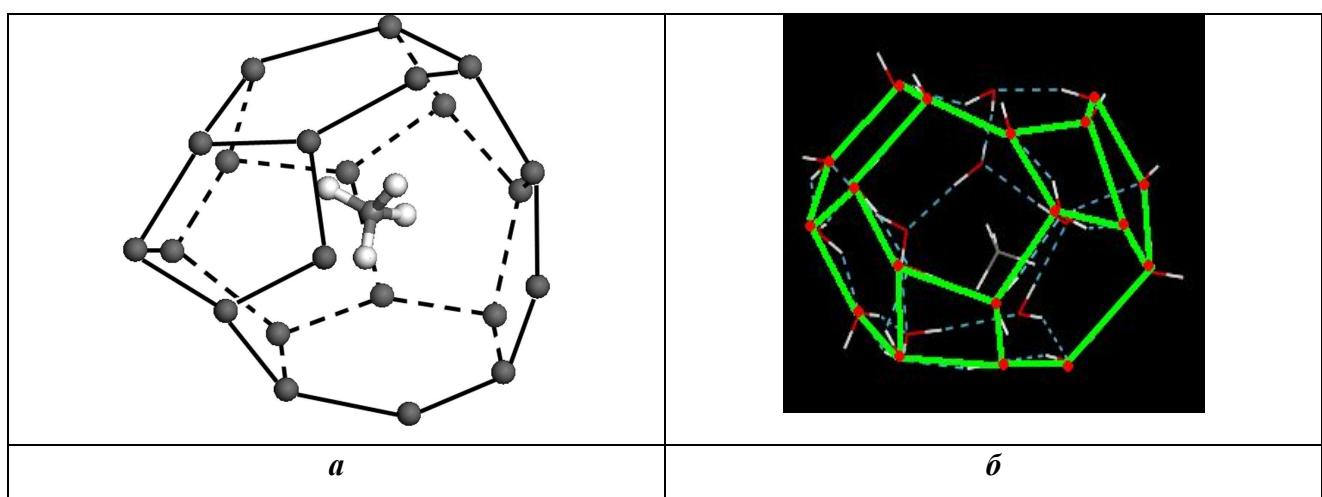


Рис.6.19. Образование декацикла в тетракадекаэдре из молекул воды при молекулярно-динамическом моделировании [288] фазового перехода газогидрат – лед. В момент начала фазового превращения обнаружен теоретически предсказанный полиэдр-интермедиат. Хотя структура достаточно искажена (за счет колебаний молекул воды), очевидно, что на месте 4-х пятиугольников возникли два шестиугольника и два четырехугольника.

(*a*) Образование декацикла в полиэдре-полости рис.6.13 в момент начала фазового превращения газогидрат – лед.

(*б*) Один из ракурсов рисунка (*a*), в котором подчеркнуты искажения за счет колебаний молекул воды.

6.7. Заключение

Результаты настоящей главы позволяют сделать следующие выводы:

1. Плотнейшая нерешетчатая упаковка шаров аппроксимируется лишь статистическим разбиением на простые 14-гранники с 4, 5 и 6-угольными гранями. Строение первой координационной сферы решетки E_8 , группы Матье M_{12} и конструкции алгебраической геометрии позволяют определить таблицу инцидентности 12×12 параллелоэдра Кельвина-Федорова (TI_{KF}), 24 вершины которого принадлежат двум (условно, “белому” и “черному”) прямым икосаэдрам. Наличие подгрупп $M_n S_{12-n}$, $n = 8, 9, 10, 11$ в группе M_{12} определяет возможность существования диагональных блоков $n \times n$ и $(12-n) \times (12-n)$ в таблицах инцидентности TI_f , симметрийно-эквивалентных TI_{KF} по группе M_{12} .

2. Вывод всех таблиц инцидентности TI_f , симметрийно-эквивалентных TI_{KF} по группе M_{12} (в частности, отличающихся от нее только смещением знаков инцидентности в недиагональных блоках), приводит к определению набора из 10 простых 24-вершинных 14-гранных стереоэдров с 4-, 5- и 6-угольными гранями.

3. Строение газогидратов может быть сведено к трехуровневой схеме: полиэдры-полости, стержни из полиэдров-полостей, объединение стержней. Структуры каждого уровня рассматриваются как евклидовы реализации конструкций комбинаторной (алгебраической) геометрии и, следовательно, позволяют априори определять необходимые (симметрийные) условия образования и разложения газогидратов.

4. Стержни из $2L$ -вершинных простых полиэдров, $L = 10, 12$, характеризуются трехкоординированным бихроматическим графом с ТИ размером $L \times L$ и подтаблицей TI_p размера $p^r \times p^r$, определяющей $2p^r$ -вершинный граф с группой симметрии $G((p^r)_3)$, $p^r + 3 = L$, p – простое число, $r = 1, 2, \dots$. Расширения TI_p до TI_f , $f = 1, 2, \dots$ размером $L \times L$ задают графы $2L$ -вершинных полиэдров (кластеров), содержащие изоморфные $2p^r$ -вершинные подграфы. Возможность взаимных трансформаций стержней из таких полиэдров определяется условием: $C_{L/\mu} \subset G((p^r)_3)$, $\mu = 1, 2, \dots$, где C_L – циклическая группа порядка L .

5. Фазовое превращение газогидрат I – гексагональный (обычный) лед предлагается рассматривать как результат трансформации стержней из 24-вершинных 14-гранных тетракадекаэдров (с локальной винтовой осью 12-го порядка) в стержни из параллелоэдров Кельвина-Федорова с трансформацией последних в стержни из 24-вершинных кластеров льда. Возможность взаимных трансформаций 24-вершинных кластеров, образующих эти стержни, определяется эквивалентностью (по группе M_{12}) таблиц инцидентности их графов. При сохранении молекулы-гостя тетракадекаэдр трансформируется в интермедиат –

параллелоэдр Кельвина-Федорова, граф которого содержит 2·9-вершинный подграф с группой симметрии $G(9_3)$ порядка 216. Молекула-гость выходит через "боковой" декацикл этого 2·9-вершинного подграфа, что приводит к "схлопыванию" параллелоэдра Кельвина-Федорова в равновершинный кластер гексагонального льда. Группа $G(9_3)$ содержит подгруппу C_6 , поэтому обусловленность трансформации стержня трансформациями образующих его полиэдров является симметрийно-допустимой.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [47, 49, 62, 70, 71, 73, 74].

Глава 7. Закономерности строения спиральных биополимеров как структурные представления конструкций алгебраической геометрии.

Пример α -спирали

7.1. Введение

Изучение строения и свойств биополимеров различного уровня организации требует определения их симметрии, которая (в общем случае) не отображается федоровскими группами, описывающими симметрию кристаллов. Поэтому систематизация структур основных элементов белковых конструкций (включая спиральные) является актуальной и, фактически, только начинает формализовываться. В частности, существующая структурная классификация белков основана на биоинформатике, использующей возможности компьютерного перебора и позволяющей непосредственно сопоставлять белки [223], а не указывать классифицирующие их симметрийные конструкции (которыми в случае кристаллов являются федоровские группы).

Вторичная структура белка во многом определяется жесткими ковалентными связями в полипептидной цепи и водородными связями между ее боковыми звеньями. Важную роль также играют стерические взаимодействия молекул, которые связаны с их размерами и формами, накладывающими жесткие структурные ограничения на способы размещения молекул в пространстве. Подобные взаимодействия во многом определяют и упаковки молекул в спирали, широко распространенные в биологическом мире. В то время как определение точной геометрии биологических спиралей может быть весьма затруднено, их топология определяется непосредственно из стерического рассмотрения. Белки рассматриваются как плотная упаковка более или менее близких по размерам сферических единиц - аминокислот, аппроксимируемая упаковкой тетраэдров. Различные уровни структуры белка: первичная, вторичная или третичная соотносятся с плотноупакованными структурами в 1-м, 2-х или 3-х измерениях. Плотнейшая упаковка 600 правильных тетраэдров достигается в 4-мерном политопе $\{3,3,5\}$, связь подструктур которого с α -спиралью была продемонстрирована в [143].

Однако в общем случае критерий плотной упаковки сфер не определяет вторичную структуру белка [289]. Необходимым условием существования кристаллической структуры является возможность её вложения в E^3 , которое гарантируется наличием пространственной группы – группы дискретных движений пространства E^3 , сохраняющих расстояния между точками. Аналогично, необходимым условием существования α -спирали должно быть

существование математических конструкций, определяемых свойствами E^3 и определяющих (топологически устойчивую) спираль, практически, не зависящую от последовательности аминокислот в полипептидной цепи. Подтверждением такого предположения могут служить данные сравнительного анализа среднеквадратичных смещений атомов и В-фактора, отражающего насколько восстановленная вокруг него электронная плотность шире, чем в идеальной модели. Они показывают, что гибкие и жесткие участки трехмерной структуры белка остаются консервативными в процессе эволюции. Теоретические расчеты В-фактора и среднеквадратичных смещений также показали, что именно они в большей степени определяются фолдингом (сворачиванием полипептидной цепи в пространственную структуру) и структурой белка, и практически не зависят от последовательности аминокислот в полипептидной цепи [290]. В общем случае и критерий плотной упаковки трубчатых спиралей [291] также не определяет вторичную структуру белка, к которой относится α -спираль.

Изучение α -спирали и других спиральных биополимеров ответило на вопрос, как они устроены [167, 219, 220], но проблема адекватного симметрийного обоснования необыкновенной устойчивости таких систем остается актуальной.

7.2. Тетраэдрические спирали в политопе {3,3,5}

Все 120 вершин политопа {3,3,5} разделяются на четыре набора вершин A, B, C, D (по 30 вершин в каждом), координаты вершин указаны Коксетером [24]. После проектирования на плоскость наборы A, B, C, D образуют четыре концентрических правильных тридцативершинника (триаконтагона), вписанных в окружности радиусов a , b , c , и d . На рис.7.1. воспроизведена построенная Коксетером двумерная проекция всех четырех тридцативершинников, т.е. всех 120 вершин политопа {3,3,5}. На каждой из четырех концентрических окружностей расположены вершины одного набора A, B, C, или D. Эти вершины объединяются в тетраэдры, как показал Коксетер, 600 тетраэдров политопа {3,3,5} разбиваются на 4 «симметричных» типа с вершинами AAAA, AABB, CCDD, DDDD по 30 тетраэдров в каждом, и 8 «асимметричных» типов AAAB, AABC, ABBC, ABCC, BBCD, BCCD, BCDD, CDDD по 60 тетраэдров в каждом.

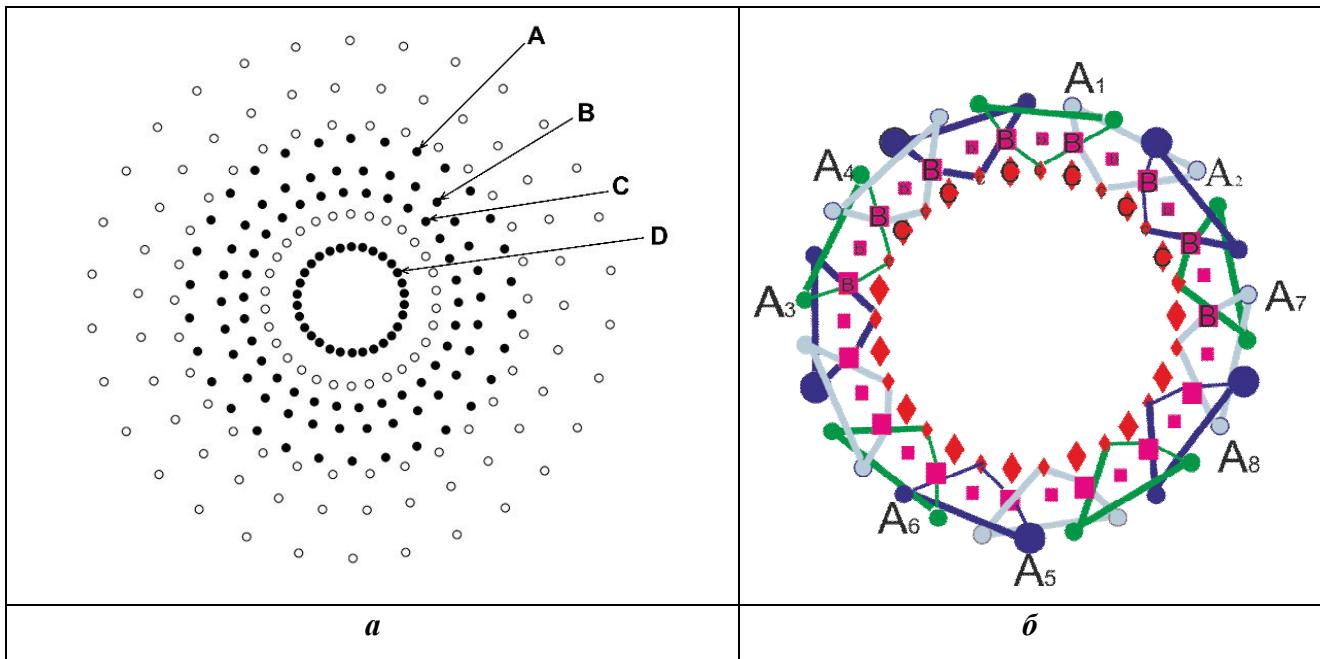


Рис.7.1.

(а) Проекция четырех тридцативершинников типа А, В, С, или D, на которые разбиваются все 120 вершин политопа {3,3,5}. На каждой из четырех концентрических окружностей расположены вершины одного тридцативершинника.

(б) На проекции а) показаны 15 непересекающихся тетраэдров из политопа {3,3,5}, 60 вершин которых охватывают все вершины А(кружки), четные вершины В (большие квадраты) и нечетные С (малые ромбы). Каждый тетраэдр содержит 2 вершины типа А и по одной вершине типов В и С. Ось 15/4 переводит A_1A_2 в A_3A_4 , A_3A_4 в A_5A_6 , A_5A_6 в A_7A_8 .

Тетраэдры типа АААА составляют 30-вершинный тор - объединение 30 правильных тетраэдров по граням, с нецелочисленной поворотной осью 30/11, совпадающей с большой осью тора и с углом вращения вдоль оси $360:(30/11) = 132^\circ$ [24]. Перпендикулярно оси 30/11 (рис.7.2а) проходят оси 2-го порядка.

Квадратом оси 30/11 является ось 15/4 противоположной хиральности: $132^\circ + 132^\circ - 360^\circ = -(360^\circ : 15) \cdot 4$. На рис.7.2б черным и голубым цветами обозначены две спирали, представляющие собой орбиты ребер, размножаемых осью 15/4. Вершины на черной спирали имеют нечетные номера $2i-1$, $i = 1, 2, \dots, 15$, вершины на серой спирали имеют четные номера $2i$, $i = 1, 2, \dots, 15$. Выбор номеров вершин ребер определяется тем, что каждая вершина принадлежит и спирали 10/1 (рис.7.2б), и спирали 15/4. При этом в спирали 10/1 спираль 15/4 охватывает только половину вершин. Если вершина на спирали 10/1 принадлежит и спирали 15/4, то следующая вершина на спирали 10/1, принадлежащая той же спирали 15/4, будет достигнута при движении по трем ребрам этой спирали 15/4.

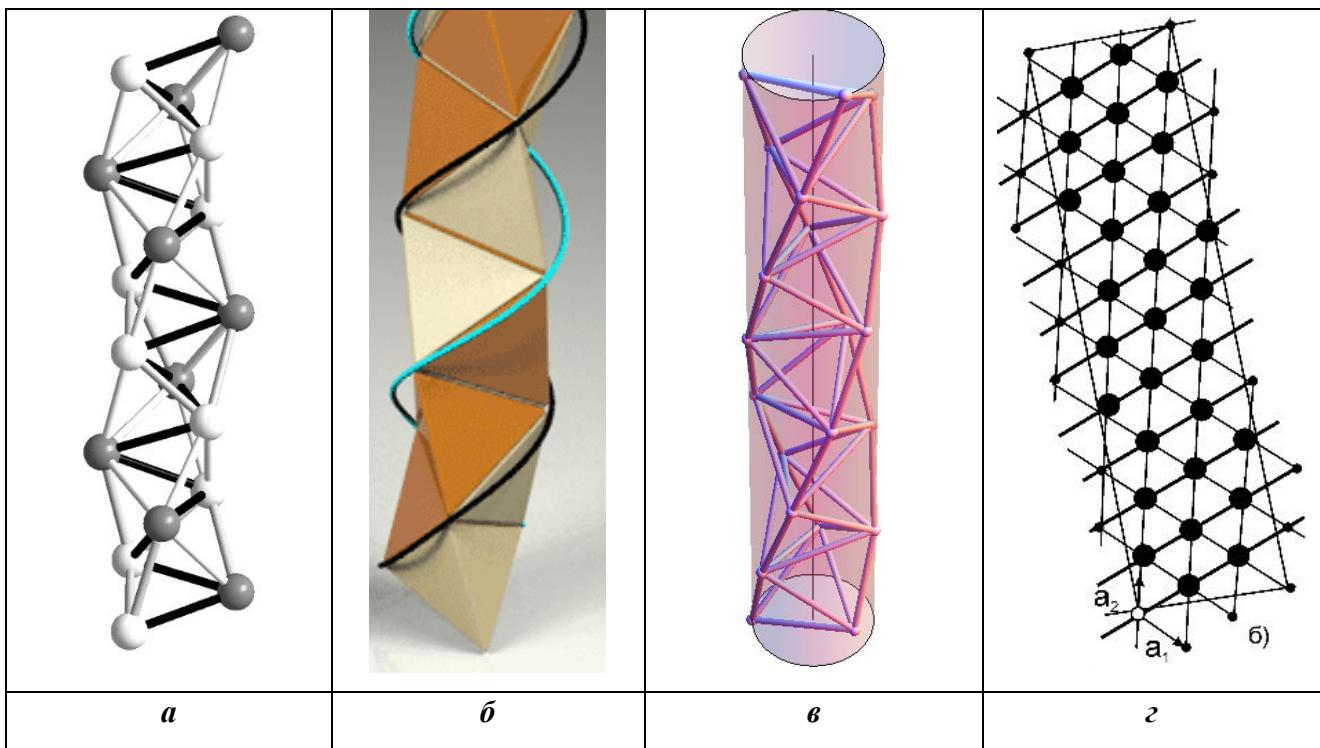


Рис.7.2.

- (а) Черными линиями показана спираль 30/11 - орбита ребер винтовой оси 30/11 в тетраспирали.
- (б) Черными и голубыми линиями показаны спирали 15/4 - орбиты ребер винтовой оси 15/4 в тетраспирали. Орбиты треугольников винтовой оси 15/4 показаны коричневым и пастельным цветами.
- (в) Вершины трех спиралей 10/1 (орбиты ребер винтовой оси 10/1) в тетраспирали находятся на поверхности цилиндра.
- (г) Отображение тетраспирали из политопа {3,3,5} в (почти) прямоугольник гексагональной сетки с отождествляемыми парами сторон [143].

В замкнутой тетраспирали (рис.7.2) циклическая группа 15 порядка (соответствующая оси 15/4), порождается винтовым поворотом g_2 на -96° и обладает также орбитой из 15 изолированных дуг от друга ребер (A_{2i-1}, A_{2i}), которые охватывают все 30 вершин A_{2i-1}, A_{2i} , $i = 1, 2, \dots, 15$, принадлежащих тетраспирали:

$$15/4 (A_1, A_2) = \{g_i(A_1, A_2) = (A_{2i-1}, A_{2i}) \mid i = 1, 2, \dots, 15, \quad g_1 = g_2^{15} = 1\}, \quad (7.1)$$

где g_i элементы циклической группы 15/4. Выражение (7.1) определяет орбиту ребер (A_{2i-1}, A_{2i}), на рис.7.2б. Очевидно, что наряду с орбитой 15/4 (A_1, A_2), все 30 вершин замкнутой тетраспирали охватываются и конгруэнтной орбитой из 15 изолированных ребер (A_{2i}, A_{2i+5}), $i = 1, 2, \dots, 15$ той же группы 15/4.

7.2.1. Обвивающая тетраспираль спираль тетраблоков с винтовой осью 15/4

Для построения внешней оболочки из тетраэдров к тетраспирали, составленной из тетраэдров AAAA, надо к каждому ребру типа (A_1, A_2) добавить перпендикулярное ему ребро. В нашем распоряжении имеются наиболее близкие к этой тетраспирали вершины типов B и C (вершины D слишком далеки), т.е. для образования тетраэдра можно добавлять ребра BC или BB, поскольку, согласно Коксетеру [24], тетраэдров AACС в политопе {3,3,5} нет. Построение внешней оболочки ТКБ начнем с варианта построения тетраэдра оболочки добавлением ребра BC к ребру типа A_1A_2 (рис.7.3).

Ребро B_1C_1 , перпендикулярное ребру A_1A_2 , определит тетраэдр $A_1A_2B_1C_1$ (рис.7.3 δ), 15 тетраэдров этого типа в оболочке ТКБ будут изолированы друг от друга, поскольку 15 ребер типа A_1A_2 изолированы друг от друга. Соединение вершины B_1 с вершинами A_3, A_4 , и C_2 приводит к возникновению трех тетраэдров $A_1A_2A_3B_1$, $A_2A_3A_4B_1$ и $A_3A_4B_1C_2$ между изолированными тетраэдрами $A_1A_2B_1C_1$ и $A_3A_4C_2B_2$. Соединение всех вершин изолированных друг от друга тетраэдров типа $A_1A_2B_1C_1$ приводит к 60-вершинному замкнутому спиральному объединению 60 тетраэдров по граням. Всего пришлось добавлять 30 ребер типа BC, а всего в политопе {3,3,5} 120 ребер типа BC. Как видно на рис.7.3 δ , полученная спираль обивает центральную тетраспираль.

Размещение 60-вершинной обвивающей спирали в структуре политопа {3,3,5} можно показать с помощью двумерной проекции {3,3,5} (рис. 7.1 a), на рис.7.1 δ на этой проекции выделена замкнутая обвивающая спираль из 15 изолированных тетраэдров типа $A_1A_2B_1C_1$ этой обвивающей спирали. Вершины этих тетраэдров охватывают все 30 вершин типа A и по 15 вершин типов B и C.

Поскольку диаметр обвивающей спирали из тетраэдров такой же как у замкнутой в тор тетраспирали, которую она обивает, то будем называть ее обвивающей тетраспиралью (ОТ). В объединении тетраспирали и ОТ возникает объединение по граням 5 правильных тетраэдров у одного ребра. При выпрямлении такого объединения из 3-мерного пространства положительной кривизны (разбиением которого на 600 правильных тетраэдров является политоп {3,3,5}) в 3-мерное Евклидовом пространство E^3 (нулевой кривизны) между первым и пятым тетраэдрами возникнет щель в ~ 7.35 градуса. Поэтому размыкание замкнутой в тор тетраспирали и отображение ее в E^3 приводит либо к тетраспирали из идеальных тетраэдров (рис.7.3 δ), которая обивается ОТ из слегка искаженных тетраэдров; либо тетраэдры в тетраспирали слегка искажены, а тетраэдры в ОТ – идеальны (рис.7.3 ε); либо тетраэдры в тетраспирали и ОТ слегка искажены. Тетраэдры из ОТ будут обивать тор, разбитый на тетраэдры AAAA, при наличии ребра AA или грани AAA. Таким образом, из всех

возможных в $\{3,3,5\}$ тетраэдров [24] в ОТ допустимы лишь тетраэдры трех типов: AAAB, AABB, AABC.

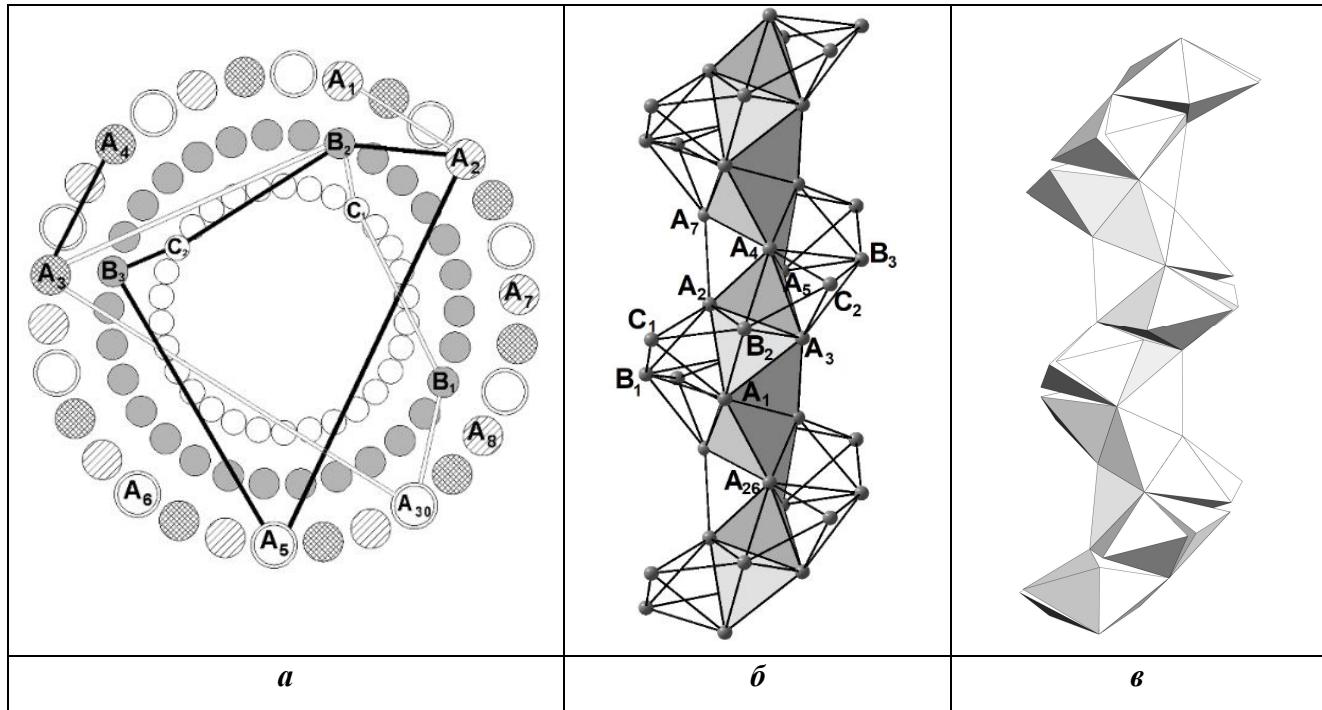


Рис.7.3.

(а) Проекция вершин политопа $\{3,3,5\}$, на которой показано объединение 2 пентагональных бипирамид по треугольной грани. Ось A_1A_2 и “экватор” $A_3B_2C_1B_1A_{30}A_3$ пентагональной бипирамиды показаны белыми линиями, ось A_3A_4 и экватор $B_3C_2B_2A_2A_5B_3$ соседней бипирамиды показаны черными линиями. Вершины A_3 , B_2 , и A_2 образуют общую грань этих двух пентагональных бипирамид. Триаконтаэдр А разделен на 3 декагона, вершины каждого из них показаны различными кружками. Каждый декагон соответствует одной спирали 10/1 на рис.7.2 в.

(б) Спираль из объединяемых по грани тетраблоков обвивает тетраспираль.

(в) Обвивающая спираль как объединение правильных тетраэдров.

Можно показать, что в политопе каждое из 15 ребер $g_i(A_1, A_2)$ может принадлежать только тетраэдру типа AABC, в котором ребро BC перпендикулярно ребру $g_i(A_1, A_2)$. Если ребро – типа BB, то в силу изолированности друг от друга ребер $g_i(A_1, A_2)$ это приведет к появлению 15 изолированных друг от друга ребер $B_{2i-1}B_{2i}$. Соединение этих ребер между собой приведет к появлению еще 15 ребер BB между ними. Таким образом, если перпендикулярно ребрам $g_i(A_1, A_2)$ будут находиться ребра $B_{2i-1}B_{2i}$, то это приведет к 30 ребрам BB. Аналогично вышеизложенному, если перпендикулярно ребру (A_{2i}, A_{2i+5}) будет

проходить ребро (B_{2i}, B_{2i+5}) , то это приведет к появлению еще 30 ребер ВВ в ОТ', конгруэнтной рассмотренной ОТ. Итак, если в этих двух ОТ есть тетраэдры типа ААВВ, то в $\{3,3,5\}$ должно быть 60 ребер ВВ, что невозможно, т.к. в $\{3,3,5\}$ только 30 ребер ВВ. Таким образом, в ОТ могут быть лишь тетраэдры АААВ и ААВС.

Поскольку перпендикулярно ребрам $g_i(A_1, A_2)$ будут находиться ребра типа ВС, то соединение всех вершин изолированных друг от друга тетраэдров ААВС приводит к 60-вершинной ОТ, обвивающей замкнутую центральную тетраспираль (рис.7.3б) и содержащую 60 тетраэдров. Из них 15 - это изолированные друг от друга тетраэдры типа $A_1A_2C_1B$, а 45 - промежуточные между ними тетраэдры: 15 типа $A_1A_2A_3B$, 15 того же типа $A_2A_3A_4B$ (вершины A_i, C_j – разные вершины типа А и С) и 15 - типа $A_3A_4BC_2$. Независимую 1/15 часть ОТ составляет подробно рассмотренный в главе 2 тетраблок Δ - объединение по граням 4-х тетраэдров: $A_1A_2C_1B$, $A_1A_2A_3B$, $A_2A_3A_4B$ и $A_3A_4BC_2$ с общей вершиной В (рис.7.3б), через которую проходит ось 2 порядка. Таким образом, ОТ возникает в результате размножения тетраблока осью 15/4:

$$OT = 15/4 \cdot \Delta = 15/4 \cdot (A_1A_2C_1B \cup A_1A_2A_3B \cup A_2A_3A_4B \cup A_3A_4BC_2) \quad (7.2)$$

Аналогично вышеизложенному можно показать, что в политопе каждое из 15 ребер (A_{2i}, A_{2i+5}) принадлежит только тетраэдру типа ААВС, в котором ребро типа ВС перпендикулярно ребру (A_{2i}, A_{2i+5}) . Это приводит к 60-вершинной ОТ', конгруэнтной ОТ и обвивающей ту же центральную тетраспираль. В центральной тетраспирали каждая вершина – центр тетраблока, поэтому существует ось 5 порядка, проходящая по ребру (A_1, A_2) , которая отображает Δ в тетраблок Δ_0 (с вершинами A_1, A_2, \dots, A_7 , - рис.7.3б), генерирующий тетраспираль. Таким образом, разбиваемая на пересекающиеся тетраблоки 30-вершинная тетраспираль будет обвиваться ОТ и ОТ', что добавит к ней 60 вершин и 120 тетраэдров.

7.3. Минимальная поверхность с нулевым индексом неустойчивости, определяющая особый шаговый угол спирали

В работе [78] было показано, что для описания спиральных структур необходимо использовать наиболее общие линейчатые минимальные поверхности - катеноид и геликоид, вложимость которых в E^3 определяют политопы. При проектировании S^3 в E^3 вершины политопа, располагаются на поверхности катеноида – минимальной поверхности, обладающей в среднем нулевой кривизной. Мыльная пленка, натянутая на двойную спираль из проволоки, образует геликоид, также являющийся минимальной поверхностью. Все

неконгруэнтные полные минимальные линейчатые поверхности образуют однопараметрические семейства геликоидов, для которых в качестве параметра можно выбрать шаг H спирали радиуса R . При уменьшении H до некоторого значения H_{kp} , наступит момент, когда пленка перестанет быть геликоидом и затянет дополнительную поверхность между спиральными. Таким образом, существует единственная минимальная поверхность - общая для геликоида и катеноида [78], которая характеризуется особым (критическим) соотношением шага спирали к радиусу [274].

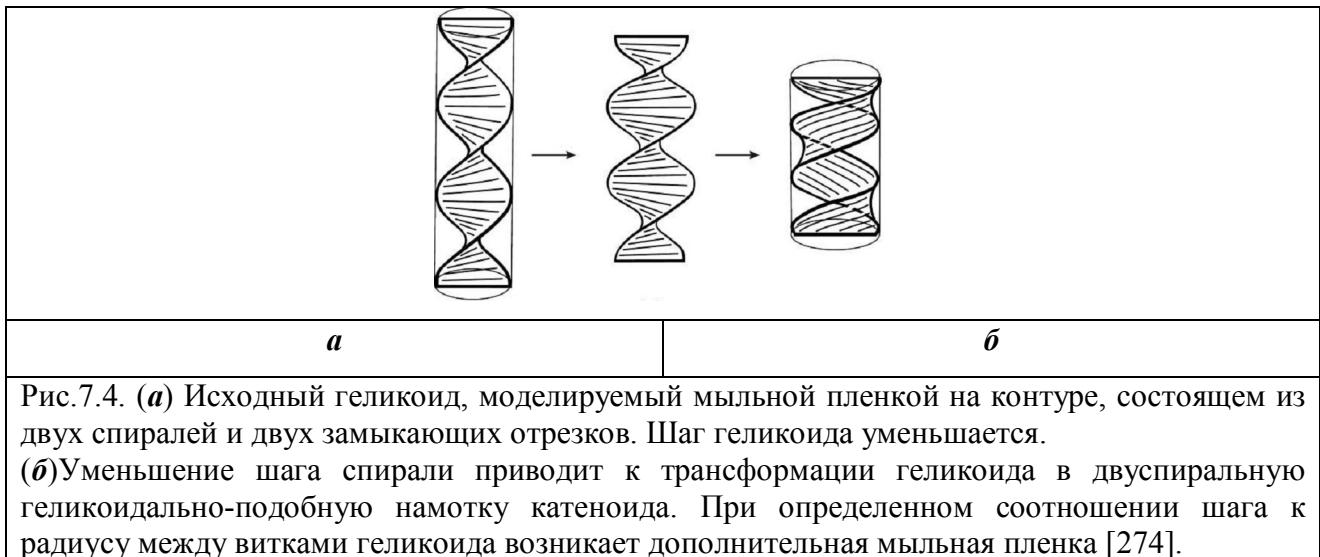


Рис. 7.4. (а) Исходный геликоид, моделируемый мыльной пленкой на контуре, состоящем из двух спиралей и двух замыкающих отрезков. Шаг геликоида уменьшается.
(б) Уменьшение шага спирали приводит к трансформации геликоида в двусpirальную геликоидально-подобную намотку катеноида. При определенном соотношении шага к радиусу между витками геликоида возникает дополнительная мыльная пленка [274].

Для описания всех минимальных поверхностей, затягивающих контур, состоящий из двух соосных окружностей радиуса R , расположенных в параллельных плоскостях на расстоянии H , достаточно описать все затягивающие его катеноиды. При малых H в системе имеется точка бифуркации H_{kp} , определяющая две конфигурации: устойчивую - близкую к цилиндру и неустойчивую - близкую к конусу. Данная точка задается единственным положительным решением уравнения [274]:

$$\operatorname{cth}(H_{kp}/2R) = (H_{kp}/2R) = \pi/\tau^2 = k \approx 1.2 \text{ (более точно } 1.1996786\ldots\text{)}, \quad (7.3)$$

связывающего 2 константы: π и золотое сечение $\tau = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1,618$. Таким образом, при определенном критическом значении H_{kp} реализуется единная конфигурация - пленка, которая затягивает каждую из окружностей плоским диском [274]:

$$H_{kp}/R = 2\pi/\tau^2 \approx 2.4 \text{ и } H_{kp}/2\pi R = \operatorname{tg} \theta_{kp} \approx 0.38187 \approx 1/\tau^2, \quad (7.4)$$

где шаговый угол $\theta_{kp} \approx 20,906^\circ$ - угол между двойной и тройной осью икосаэдра. Итак, подобная пленка - единственная минимальная поверхность, общая для геликоида и катеноида, определяется особым шаговым углом $\theta_{kp} \approx 20,906^\circ$ задающих ее спиралей [78].

Соотношения (7.3), (7.4) задают особую точку бифуркационной природы, которая определяет условие перехода от локально-минимальной к локально-цилиндрической поверхности, для которой окрестности каждой точки аппроксимируются цилиндрически подобной поверхностью. Использование точек, принадлежащих как катеноиду, так и геликоиду является алгебраическим приёмом, позволяющим применять сопряженные поверхности и вводить конечные (дискретные) конструкции.

Устойчивость минимальной поверхности характеризуется индексом неустойчивости поверхности ($\text{Ind } M$), соотносящимся с числом топологически различных способов изменения ее площади. Минимальная поверхность M устойчива, если любая непрерывная вариация на ее границе увеличивает площадь M . Неустойчивость M увеличивается с ростом $\text{Ind } M$, который составляет 1 для катеноида и ∞ для геликоида. В сочетании с введением внешней метрики (что физически эквивалентно заданию фиксированных расстояний между атомами, молекулами или их центрами) устойчивость M позволяет утверждать наличие определенного типа устойчивости и для ограниченного M объема. Общая для катеноида и геликоида поверхность M является полной минимальной поверхностью и может быть построена с применением представлений Вейерштрасса [274].

Пусть M задана глобальным представлением Вейерштрасса, определяемом, помимо прочих параметров, областью U комплексной плоскости C . Согласно [274], если для минимальной поверхности M_0 с конечным индексом неустойчивости образ области U содержитя при гауссовом отображении в определенном сферическом поясе Q сферы S^2 (единичного радиуса), тогда $\text{Ind } M_0 = 0$. Для выполнения условия $\text{Ind } M_0 = 0$ необходимо, также, чтобы поверхность M_0 была некомпактной (а именно, без края) или компактной, но с непустой границей и незамкнутой. Сферический пояс Q должен быть заключен между двумя параллельными плоскостями, которые отстоят от центра сферы на расстояния $th(k)$ и отсекают приполюсные области [274], составляющие каждая $1/12$ поверхности сферы. В таком случае, сферический пояс $Q(k=H_{kp}/2R)$ сферы S^2 составляет $5/6$ ее поверхности. Изменение H до H_{kp} определяет набор коаксиальных катеноидов, который вкладывается в проекцию S^3 в E^3 [78]. Сфера S^3 топологически изоморфна группе $SU(2)$ (комплексных матриц 2×2), чьим пространством главного расслоения является погруженная в E^8 сфера S^7 . Суммируя вышеизложенное, получаем соотношения, определяющие топологический базис искомой конструкции

$$CP^1 \rightarrow C \supset U \rightarrow Q(k) \subset S^2 \subset S^3 \leftarrow S^7, \quad (7.5)$$

где CP^1 - диффеоморфная сфере S^2 комплексная проективная прямая, соответствующая расширению комплексной плоскости C точкой на бесконечности. Стрелка обозначает (гомоморфное) отображение в рассматриваемое подмножество. Для геликоида M декартовы

координаты точек задаются гиперболическими функциями, тогда, при условии конформности реализуемых на минимальной поверхности построений, отображение $S^2 \rightarrow S^2$ является мёбиусной трансформацией. Каждая конечная подгруппа группы дробно-линейных преобразований соответствует полиэдральным (точечным) группам в E^3 . Аддитивность и инвариантность для гиперболических движений возможны для углов с общей вершиной, которые можно выразить через площадь соответствующего сектора вращения, умноженную на метрический коэффициент $k = 1.2$ [292].

Поверхность называется изотермической, если в окрестности каждой её точки (кроме определенных особых точек) можно задать изотермические координаты [274]. Для рассматриваемых структур термин изотермичности эквивалентен термину эквипотенциальности. Последнее подразумевает, что между сечениями устойчивой трёхмерной структуры не должна возникать разность потенциалов. Таким структурам отвечает размещение условных центров упаковки по изотермическим сеткам, которые соответствуют окружностям Вилларсо на торе. Конформный диффеоморфизм $S^2 \rightarrow S^2$ как мёбиусная трансформация, соотносится с проективными преобразованиями RP^3 , если рассматриваются изотермы. Минимальные поверхности изотермичны, а триангулированные изотермические поверхности инвариантны относительно мёбиусной геометрии [293]. Поэтому нам достаточно ограничиться такими триангулированными изотермическими минимальными поверхностями, для описания которых можно применять мёбиусную геометрию в кватернионной реализации: кватернионное вырождение сопоставить паре взаимно инверсных структур, а инволюции - инверсию S^n ($n \geq 2$). Кроме того, все периодические минимальные поверхности имеют бесконечный индекс неустойчивости [274], поэтому необходимо использовать конструкции локально периодических (точнее, локально решетчатых) систем с конечной полной кривизной. Это также определяет необходимость применения дискретной дифференциальной геометрии, в частности, её мёбиусной интерпретации [294].

7.4. Подструктуры политопа $\{3,4,3\}$, конструкция Госсета и винтовая ось 40/11

Рассмотрим поверхность M_0 , которая определяет упорядоченную 3-мерную спиральную упаковку при условии связывания особых точек M_0 удовлетворяющими (7.5) преобразованиями симметрии соответствующих решеток векторов. В качестве симметрий, связывающих особые точки M_0 , достаточно рассматривать симметрии, определяемые

подструктурами 8-мерной решетки октавы E_8 , замыкающей ряд возможных чисел: действительные–комплексные–кватернионы–октавы [16]. Для n -мерной решетки координационная сфера S^{n-1} определяет систему векторов и, соответственно, n -мерный полиэдр – регулярный или нерегулярный политоп [24]. Группы симметрии 4-мерных политопов – группы дробно-линейных преобразований [244]. Политоп $\{3,4,3\}$ наиболее близок к экстремуму функционала объема, соответствующему 4-мерному шару. Минимальная поверхность M_0 также является экстремумом функционала объема, поэтому базовым политопом для дискретной реализации конструкции M_0 необходимо выбрать политоп $\{3,4,3\}$ [24, 78].

Одной из локально-периодических решеток, удовлетворяющей указанным выше требованиям, является вкладываемая в C над кольцом циклотомических целых решетка вида $Z[\zeta]$, где $\zeta = \exp i\pi/4$, $\zeta^2 = i$ и $\zeta^4 = -1$. Она является вариантом вещественной решетки D_4 и при сопоставлении $1 \rightarrow 1100$, $\zeta \rightarrow 0110$, $\zeta^3 \rightarrow -1001$ вершины проекции политопа $\{3,4,3\}$ на комплексную плоскость можно представить 24 элементами из $Z[\zeta]$ (рис.7.5a,b), которые могут быть отождествлены с 24 минимальными векторами D_4 нормы 2. Фактор-многообразие $D_4/3D_4$ состоит из 81 смежного класса: нулевого класса, 24 классов, представленных единственными векторами нормы 2, 24 классов, представленных единственными векторами нормы 4, и 32 классов, каждый из которых содержит в точности три вектора нормы 6. Существует взаимно однозначное отображение элементов кольца $Z[\zeta]/3Z[\zeta]$ на элементы поля $F_9 \times F_9$: элементы нормы 2 на элементы нормы -1; элементы нормы 4 на элементы нормы 1 и элементы нормы 6 (трехкратно) на ненулевые элементы нормы 0. Таким образом, $D_4 \leftrightarrow Z[\zeta] \rightarrow Z[\zeta]/3Z[\zeta] \rightarrow F_9 \times F_9 \rightarrow F_3$, где поле F_9 состоит из 0 и 8 степеней ζ [16].

Элементы нормы 6 из $Z[\zeta]/3Z[\zeta]$ сопоставляются 96 вершинам полурегулярного политопа $\text{rectified}\{3,4,3\}$ ($r\{3,4,3\}$), состоящего из 24 кубов и 24 кубооктаэдров. Отображению 96 вершин $r\{3,4,3\}$ в 32 элемента $F_9 \times F_9$ соответствует распределение 96-ти вершин по 32-м изолированным друг от друга треугольным граням. Центрами кубов являются вершины исходного политопа $\{3,4,3\}$, а центрами кубооктаэдров – вершины дуального политопа $\{3,4,3\}^*$. Кубы граничат друг с другом только по вершинам, кубооктаэдры – по треугольным граням, а кубы с кубооктаэдрами – по квадратным (рис.7.5c). Сечения политопа $\{3,4,3\}$ плоскостью E^3 , начиная с вершины, дают: вершину, соответствующую северному полюсу S^3 , 8 вершин северного куба, 6 вершин экваториального октаэдра, 8 вершин южного куба и вершину, соответствующую южному полюсу S^3 [24]. Вершинам политопа $\{3,4,3\}$ соответствуют 24 элемента $Z[\zeta]$, при этом ± 1

соответствует полюсным вершинам, а $Z[\zeta] \pm 1$ - остальным $22 = 2 \times 11$ вершинам северного (южного) куба и экваториального октаэдра (рис.7.5b,c). Каждая вершина $\{3,4,3\}$ – центр куба в $r\{3,4,3\}$, поэтому удаление двух полюсных вершин в $\{3,4,3\}$ приводит к удалению двух полюсных кубов (т.е. 16 вершин, обозначаемых ± 8) в $r\{3,4,3\}$. Отбрасывание 16 из 96 вершин соответствует отбрасыванию $1/6$ сферы, что позволяет отобразить оставшиеся 80 вершин ($r\{3,4,3\} \setminus \pm 8$) на сферический пояс $Q(k)$. Соответственно, в $Q(k)$ будут содержаться два 40-вершинных многообразия, соответствующих северному и южному объединениям 11 кубов $r\{3,4,3\}$.

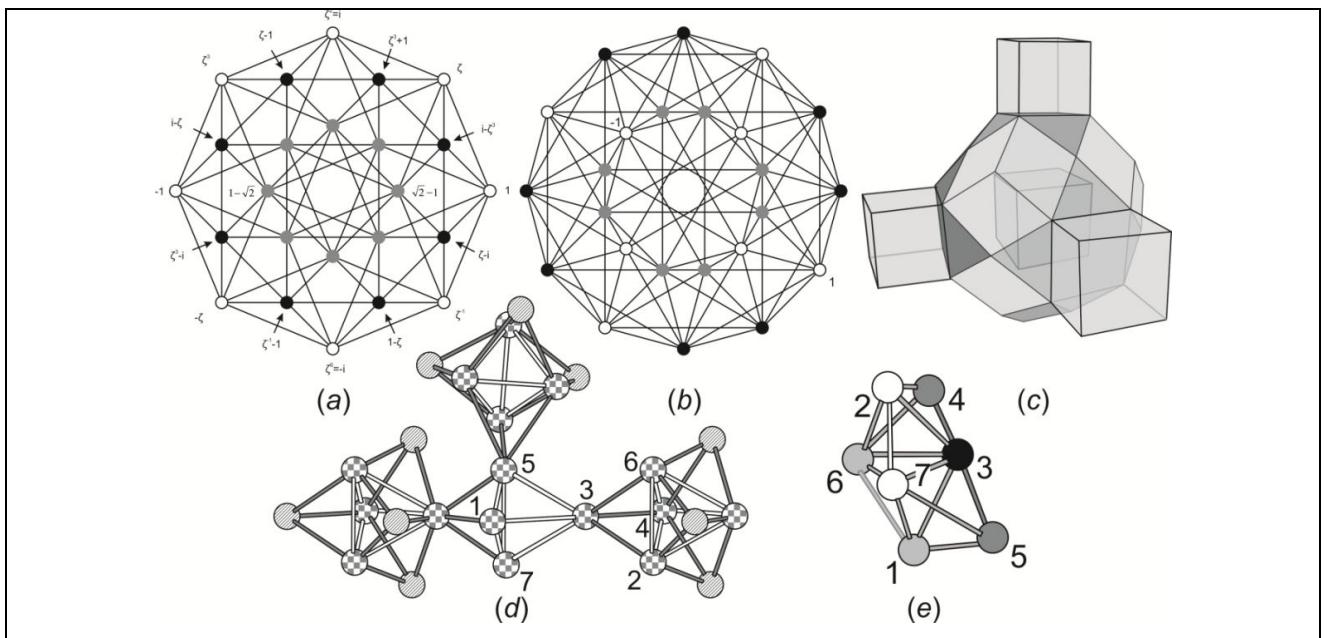


Рис.7.5.

(a) Проекция на комплексную плоскость политопа $\{3,4,3\}$, вершины которого представлены как элементы гауссовой решетки (адаптированный Рис.8.1 из работы [16]). Внутренние и наружные восьмерки вершин – вершины политопа $\{4,3,3\}$, средняя восьмерка вершин – вершины политопа $\{3,3,4\}$.

(b) Проекция на комплексную плоскость политопа $\{3,4,3\}$, вершины которого перераспределены по двум 12-вершинным цепочкам. Отбрасывание вершин, соответствующих 1 и -1 , приводит к образованию двух 11-вершинных цепочек.

(c) Куб в политопе $r\{3,4,3\}$ окружают 8 кубов, граничащих с ним по вершинам, и 6 кубооктаэдров, граничащих по граням. Их центры принадлежат сечениям политопа $\{3,4,3\}$, начиная с вершины: точке, северному кубу, экваториальному октаэдуру. Политоп $r\{3,4,3\}$ состоит из 24 кубов и 24 кубооктаэдров, заполняющих пустоты между кубами. Выделены 3 куба, стоящие на гранях 3-х кубооктаэдров, граничащих с центральным кубом. Центрами 11 кубов (без центрального), являются вершины показанной на рис. b цепочки.

(d) Цепь тетраэдрических звезд из политопа $sn\{-3,4,3\}$, содержащая цепь «внутренних» регулярных тетраэдров (показанных клетчатыми шарами), в которой каждый тетраэдр граничит с предыдущим по вершине, а с последующим по грани. Наружные вершины тетраэдрических звезд – заштрихованные шары. Вершина 3- общая для тетраэдров 3246 и 3157, образующих единый 7-вершинный объект.

(e) В 7-вершинном объединении четырех правильных тетраэдров - тетраблоке Δ_1 между тетраэдрами 3246 и 3157 находятся тетраэдры 2367 и 1367.

Таким образом, конкретизируя (7.5) для политопа $\{3,4,3\}$, получим соотношения:

$$RP^2 \subset CP^1 \supset U = Z[\zeta] \pm 1 \subset Z[\zeta] \rightarrow Z[\zeta]/3Z[\zeta] \rightarrow (r\{3,4,3\} \setminus \pm 8) \leftarrow Q(k) \subset S^2 \rightarrow RP^2, \quad (7.6)$$

где $Z[\zeta] \pm 1$ – объединение двух 11-вершинников из политопа $\{3,4,3\}$. Такой 11-вершинник ($\{4\} \cup \{3\} \cup \{4\}'$) образуют квадраты $\{4\}$ и $\{4\}'$ (две грани полярного куба, охватывающие все его вершины) и треугольник $\{3\}$ (северная грань экваториального октаэдра) при трактовке политопа $\{3,4,3\}$ как объединения его сечений начиная с точки. Последовательность таких сечений следующая: северный полюс, куб, экваториальный октаэдр, куб, южный полюс [24]. Квадрату $\{4\}$ соответствует, например, множество $\{4\}_\zeta$ из элементов ζ^{2n} , $n = 1, 2, 3, 4$, а треугольнику $\{3\}$ - множество $\{3\}_\zeta$ из элементов $\zeta, \zeta(1-\zeta), \zeta(1-\sqrt{2})$ решетки $Z[\zeta]$. В этом случае 11-вершинник $(Z[\zeta] \setminus \pm 1)/2$ – это объединение

$$(Z[\zeta] \setminus \pm 1)/2 = \Delta_\zeta \cup \varphi_\zeta \Delta_\zeta \quad (7.7),$$

двух 7-вершинников $\Delta_\zeta \leftrightarrow (\{4\} \cup \{3\})$, пересекающихся по общей треугольной грани: $\Delta_\zeta \cap \varphi_\zeta \Delta_\zeta = \{3\}_\zeta$, φ_ζ – соответствует элементу из $Z[\zeta]$, которому можно сопоставить представление вида $\exp 2\pi i k p/m$.

Конструкция Госсета трансформирует каждый кубооктаэдр политопа $r\{3,4,3\}$ в икосаэдр, а куб в тетраэдрическую звезду – центральный тетраэдр на каждой грани которого стоит тетраэдр [24]. Наружная вершина одной звезды является вершиной центрального тетраэдра другой, поэтому все 2×48 вершин полученного политопа $sn\{-3,4,3\}$ принадлежат двум двенадцатизвездным объединениям пересекающихся звезд или 2×12 изолированным друг от друга центральным тетраэдрам таких звезд (рис.7.5d). Отбрасывание полюсной звезды из двенадцатизвездного объединения приводит к разделению оставшихся 40 вершин между 7 изолированными тетраэдрами и 4 изолированными треугольниками – тетраэдрами, лишившимися одной вершины. Не принадлежащие центральному тетраэдру вершины полюсной звезды – соответствуют вершинам куба, взятым через одну, поэтому, возникающие при отбрасывании данной звезды (что соответствует определению соответствующих вершин, как неподвижных при данных преобразованиях) изолированные треугольники не могут соседствовать. Таким образом, на каждый из 7 и 4 элементов $(Z[\zeta] \setminus \pm 1)/2$ приходится соответственно четверка и тройка (не соседствующая с другими тройками) вершин политопа $sn\{-3,4,3\}$.

Вершины из $(sn\{-3,4,3\}\pm 8)/2$ могут быть отнесены к тетраэдрам и изолированным друг от друга треугольникам. В двух соседних тетраэдрах последующий можно разделить на вершину и треугольник, присоединение которого к первому тетраэдру приводит к образованию единого 7-вершинника. Аналогично, соответствующий Δ_5 7-вершинник Δ' , образуется при присоединении изолированного треугольника к тетраэдру. Рассматривая Δ' как объединение двух тетраэдров с общей вершиной, получим однородную цепь тетраэдров, в которой каждый тетраэдр граничит с предыдущим по вершине, а с последующим - по грани. Следовательно, $(sn\{-3,4,3\}\pm 8)/2$ можно отобразить в цепь, составленную из 7-вершинников Δ' , граничащих по треугольным граням (рис.7.5d).

Симплексом E^3 является тетраэдр, а объединению тетраэдров по граням соответствует симплициальный комплекс [15]. Возможность сопоставления рассматриваемой поверхности M_0 симплициального комплекса определяется тем, что в задаваемой (7.3) точке бифуркации поверхности нарушается топологическая регулярность и на соответствующем многообразии формируется клеточная структура [15]. Центрирование 24-х икосаэдров политопа $sn\{-3,4,3\}$ приводит к политопу $\{3,3,5\}$ – разбиению S^3 на 600 правильных тетраэдров, что позволяет от 7-вершинника Δ' перейти к 7-вершинному объединению по вершине 2-х тетраэдров из $\{3,3,5\}$. При соединении ребрами ближайших вершин исходных тетраэдров между ними возникают еще два, и образуется соответствующее симплициальному комплексу объединение тетраэдров по грани (рис.7.5e) - линейный тетраблок Δ_1 .

Генерирование спирали тетраблоком означает, что каждый последующий тетраблок присоединяется по грани к предыдущему по одному закону. Можно показать, что $(sn\{-3,4,3\}\pm 8)/2$ будет соответствовать 40-вершинная «U-спираль» из 11 тетраблоков, а $sn\{-3,4,3\}\pm 8$ – объединение двух таких U-спиралей. В (7.5) используется двулистное отображение элементов S^3 на S^2 , поэтому для снятия вырождения при построении поверхности в E^3 объединение двух U-спиралей должно быть удвоено. Соответственно, $sn\{-3,4,3\}\pm 8)/2$ может быть построено 80-вершинное многообразие $(tr\{3,4,3\}2x(\pm 8)/2)$ полурегулярного 192-вершинного политопа $tr\{3,4,3\}$, а также 160-вершинное многообразие $tr\{3,4,3\}2\cdot(\pm 8)$, в котором каждому из 40-элементных векторных множеств соответствует U-спираль из 11 тетраблоков. Каждая такая спираль граничит с предыдущей и последующей, поэтому, первый и последний тетраблоки U-спирали – общие с соседними U-спиралью.

Для систем, которые относятся к локально решетчатым (локально периодическим), элементы абелевой группы по модулю $2\pi i q$, порождаемой вращением на угол $q(360^\circ/N)$, задаются как $\{\exp 2\pi i k q/N \mid k = 0, 1, 2, \dots, N, \exp 2\pi i q = 1\}$. Параметр N/q определяет локальную условную ось N/q , задающую угол спирального вращения $q(360^\circ/N)$ с одновременным

локальным сдвигом вдоль условной оси на величину $1/N$. Одним из условий конечности индекса неустойчивости минимальной поверхности является дробно - рациональность, соответствующих многочленов (задающих элементы поверхности), которая гарантируется представлением m/p в виде периодической десятичной дроби $[N/q],(adc\dots)$, где $[N/q]$ - целая часть дроби [274]. Например, $40/11 = 3,(63)$, $30/7 = 4,(285714)$. Для кристалла периодом является трансляция, которая возможна лишь при целом числе элементов $[N/q],(0)$ на витке.

Локальная ось спирали $m = N/q$ является одной из осей геликоидов Госсета :

$$m = N/q = 2^\gamma 8I_n/4k_{js}m_{js} = 2^{\gamma+1} I_n/k_{js}m_{js}, \quad (7.8)$$

где $2^\gamma 8I_n$ и $8I_n$ – количество число вершин из второй и первой координационной сфер решетки E_8 ; $\gamma = 0, 1, 2$; $I_n, I_s = k_{js}(m_{js}+1)$ - инварианты E_8 , k_{js} – целое, m_{js} – один из показателей, вкладываемых в E_8 подрешеток [63]. В частности, при $\gamma = 0$, $I_n = 30$, $k_{js}m_{js} = 2 \times 11$ и $k_{js}m_{js} = 4 \times 5$ получаем $m = 30/11$ и $m = 30/10 = 3$; при $\gamma = 1$, $k_{js}m_{js} = 14$ получаем $m = 30/7$. При $\gamma = 1$, $I_n = 20$, $k_{js}m_{js} = 2 \times 11$ реализуется параметр $m = 40/11$.

Для триангулированной изотермической минимальной поверхности, задаваемой функцией $F(x,y)$, ее конформная параметризация задается равенством скалярных произведений частных производных $(\partial F/\partial x, \partial F/\partial y) = (\partial F/\partial y, \partial F/\partial y) = \exp(u)$ [294]. В рассматриваемом случае $u = -2k$, что (с точностью до 0,1%) определяет нормировку $1/11 = \exp(-2\pi/\tau^2)$ для $F(x,y)$ и, в конечном счете, равномерное распределение по 11 виткам определяемого (7.5) домена триангулированной изотермической минимальной поверхности. Таким образом, локальная ось $40/11$ удовлетворяет и (7.8), и соотношениям

$$m = 40/11 = |sn-\{3,4,3\}\pm 8|/|Z[\zeta]\pm 1| \approx 40\exp(-2\pi/\tau^2). \quad (7.9)$$

Подчеркнем, что для произвольных осей (7.8) соотношений типа (7.9) может не существовать.

7.4.1. Орбита тетраблоков винтовой оси $40/11$

Гауссово отображение тетраблока Δ_1 (рис.7.5e) определяет нерегулярную триангуляцию сферы 15 ребрами на 10 треугольников, при которой в одной вершине сходятся 6 треугольников, а в 3-х парах вершин – по 5, 4 и 3, соответственно. Согласно [78], в развертке триангулированной поверхности цилиндра, содержащей спираль $40/11$, каждому тетраблоку соответствует объединение 10 треугольников, центр которого совпадает с

центром тетраблока. Развёртки двух объединяемых по грани тетраблоков отображаются друг в друга осью 2-го порядка, развёртка U-спиралей из 11 тетраблоков определяет триангулированную U-полоску. Объединение витков спирали 40/11 определяется аналитическим продолжением соответствующей регулярной функции, описывающей один виток, вдоль некоторой кривой, разбитой на перекрывающиеся отрезки. В частности, при построении полного геликоида из отдельных витков верхний берег предыдущего витка склеивается с нижним берегом последующего. В рассматриваемом случае данное условие реализуется вложением в 160-вершинную развёртку триангулированной поверхности цилиндра объединения 4-х перекрывающихся U-полосок, каждая из которых является объединением 11 развёрток тетраблоков. Две перекрывающиеся U-полоски обладают общим центром развёртки тетраблока, поэтому центры развёрток тетраблоков образуют развёртку спирали 40/11 – распределение $40=4\cdot11\cdot4$ точек по 11 виткам. Расположение витков, удовлетворяющее всем вышеприведенным условиям, показано на рис.7.6а.

Возможность использования решёток E_8 , E_7 и E_6 связана с тем, что группы автоморфизмов плотнейших решётчатых упаковок в размерности ≤ 8 содержат подгруппы небольшого индекса, порождаемые отражениями (группы Коксетера). Наличие таких подгрупп позволяет использовать локально периодические группы, для которых можно задать целочисленные представления над конечными полями алгебраических чисел [16]. В частности, соответствующие (проективные) представления группы $PSL(2,7)$ и ее действие на векторных пространствах, приводят к циклотомическим группам, а также к связанным с ними особым типам решёток. Таковыми, в частности, являются решётки Морделла-Вейля (MW), основанные на использовании подгрупп группы автоморфизмов множества рациональных (особых) точек на (проективной) кривой или, в рассматриваемом нами случае, на минимальной поверхности [211]. Решётка $MW(E_7^*)$ – вкладываемая в $MW(E_8)$ 7-мерная подрешётка, ее первая координационная сфера содержит 56 векторов, которые соотносятся с вершинами квартиков Клейна. Можно показать, что тетраблок вкладывается в $MW(E_7^*)$. Тетраблок представляет собой часть тетраспиралей, что определяет вложение тетраблока в решётку E_8 , которая однозначно воспроизводится по политопу $\{3,3,5\}$ [16].

Объединение двух тетраблоков по общей грани (рис.7.6б) возможно по двум принципиально разным вариантам: объединяются **одинаковые** (рис.7.6в) или **различные** (рис.7.6г) цепочки типа 15/4. В отличие от равнореберного тетраблока из тетраспиралей, определяемый развёрткой рис.7.6а, тетраблок имеет и короткие ребра, образующие первую и вторую цепочки (1-3-2 и 4-6-7-5) типа 15/4. Поэтому, при первом варианте объединения получаем 11-вершинник из тетрагеликса, в котором цепочки 15/4 из коротких ребер. Спираль 40/11 из тетраблоков Δ_1 определяется вторым вариантом объединения (рис.7.6а,г).

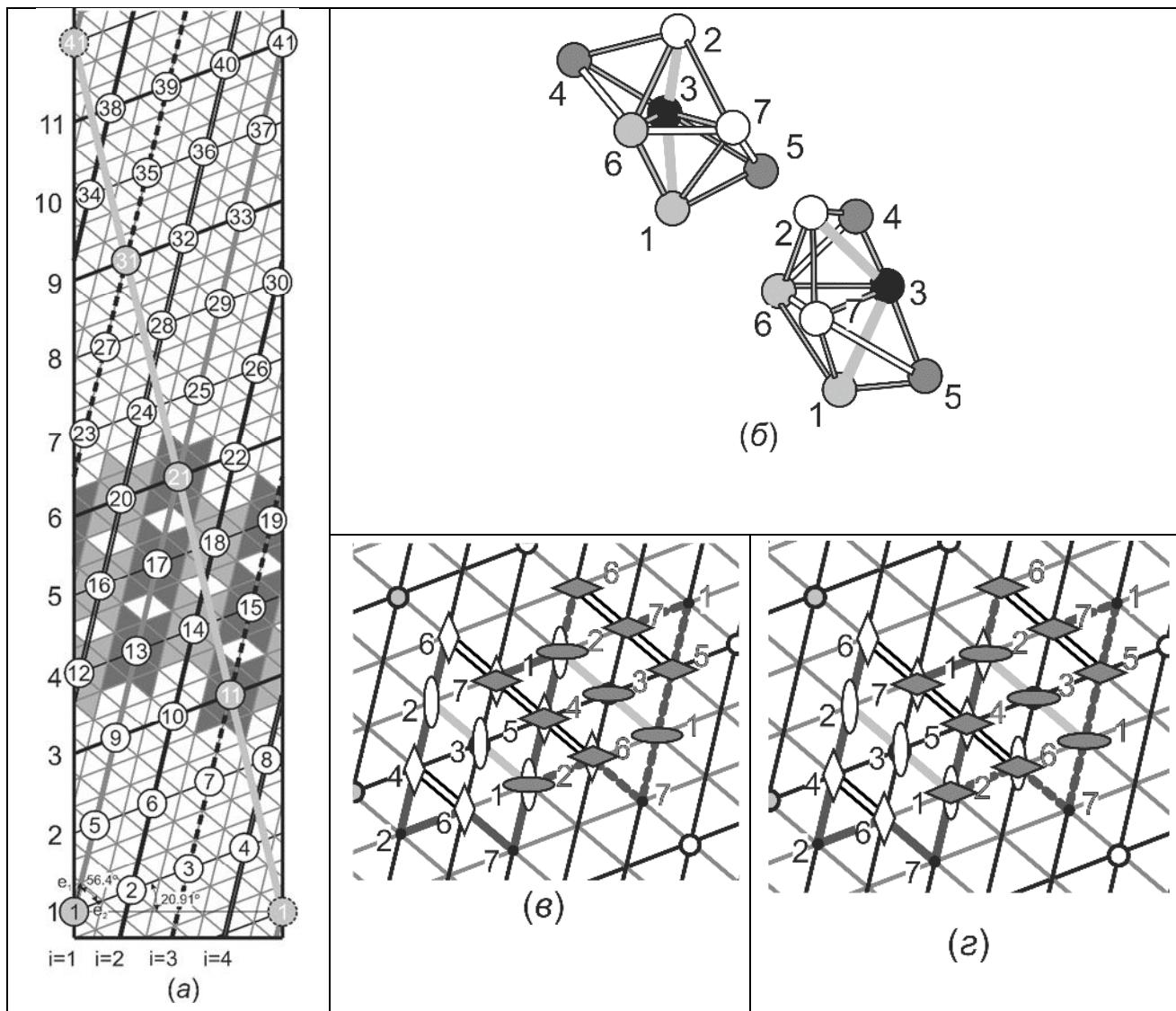


Рис.7.6.

(а) Развёртка триангулированной цилиндрической поверхности, содержащая спираль 40/11 – равномерное распределение 40 вершин по 11 виткам. На выделенных жирными линиями витках расположено по три вершины, на остальных – по четыре. Вершины i и $i + 4$ принадлежат (с учетом отождествления вертикальных границ полоски) одной из четырех i -прямых, $i = 1, 2, 3, 4$. Пересечения витков с толстой серой (диагональной) прямой делит спираль на четыре 11-вершинных части, имеющие общие вершины. Вершины 11–21, составляющие одну такую часть, являются центрами (серых и темно-серых) разверток тетраблоков, которые образуют U-полоску. Соседние серая и темно-серая развертки связаны двойной осью. Векторы e_1 и e_2 – единичны, длина вектора $e_1 - e_2$ равна 0.93.

(б) Два тетраблока, развертки которых вкладываются в развертку (а), объединяются по общей грани в 11-вершинник. В каждом тетраблоке цепочки белых и серых ребер длины 0.93 образуют спирали типа 15/4. Остальные ребра – единичной длины.

(в) Развёртка объединения по грани двух тетраблоков, генерирующего тетраспираль (рис.7.2) и сохраняющего тип цепочки 15/4: цепочки из вертикальных белых ромбов и овалов первого тетраблока объединяются, соответственно, с цепочками из горизонтальных серых ромбов и овалов второго тетраблока. Пересечения однородно: ромб-ромб и овал-овал.

(г) Развёртка объединения по грани двух тетраблоков, генерирующего обвивающий тетрагеликс (рис.7.3б) и меняющего тип цепочки 15/4: цепочки из вертикальных белых ромбов и овалов первого тетраблока объединяются, соответственно, с цепочками из горизонтальных серых овалов и ромбов второго тетраблока. Пересечение необнородно: ромб-ромб и ромб-oval. Номера вершин на рис.б-г совпадают.

Взаимная трансформация линейного Δ_1 и плоского Δ_3 тетраблоков подробно рассмотрена в главе 2. В общем случае возможно генерирование одной и той же спирали (рис.7.7 $a,б$) различными тетраблоками, например, Δ_1 и Δ_3 (рис.7.6 $б,г$, рис.7.7 $в,г$). Действительно, вокруг тетрагеликса может быть построена обвивающая его спираль 40/11 из изолированных тетраэдров (рис.3.12 $б$), каждый из которых может быть достроен до Δ_1 или до Δ_3 с образованием спирали из тетраблоков. Очевидно, что дополнительная локальная симметрия $\{(40/11)\Delta_1\} = \{(40/11)\Delta_3\}$ делает генерируемую таким образом спираль более устойчивой. Например, при сохранении спирали в целом, малые воздействия могут приводить к переходу от разбиения спирали на тетраблоки Δ_1 (рис.3.12 $г$) к ее разбиению на тетраблоки Δ_3 (рис.7.7 $г$).

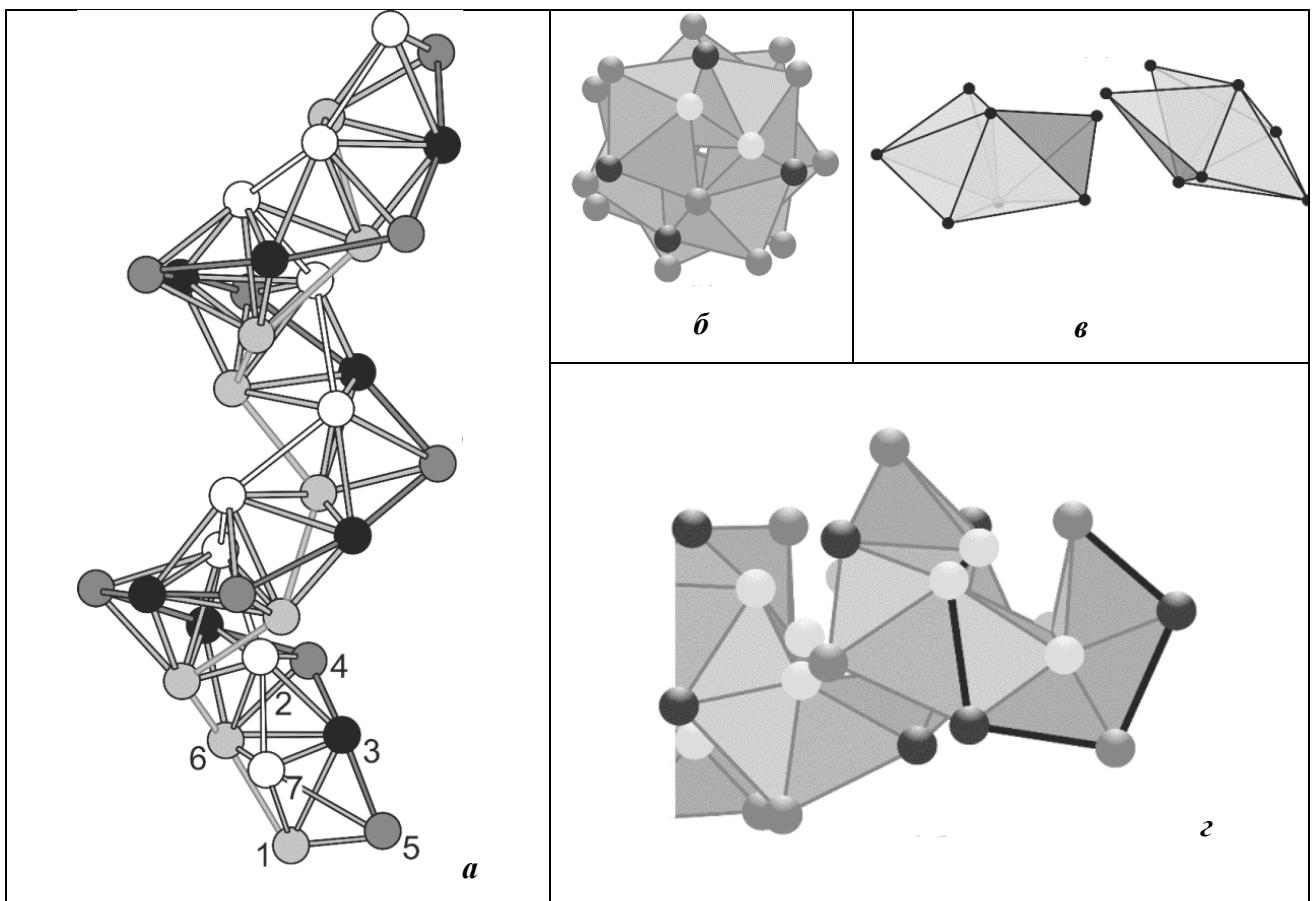


Рис.7.7.

- (а) Спиральное объединение по грани тетраблоков Δ_1 , центры которых (вершины типа 3) показаны черным. Белые, черные, серые и светло-серые шары принадлежат спиралям 40/11. Однаковые вершины на всех рисунках показаны одинаковыми цветами.
- (б) Спираль (а), вид с торца. Светло-серые шары не видны. Радиус центрального пустого канала составляет 4% от радиуса спирали - расстояния от оси спирали до черного шара.
- (в) Объединение двух плоских тетраблоков Δ_3 по затемненной грани в 11-вершинник.
- (г) Спираль из тетраблоков Δ_3 , генерируемая по закону (в). Ребра экваториального пентагона в плоском тетраблоке Δ_3 выделены жирными линиями.

Трансформация тетраблоков $f\Delta_1=\Delta_3$ осуществляется мебиусным преобразованием, поэтому генерирование спирали 40/11 из тетраблоков посредством присоединения последующего тетраблока к грани предыдущего определяются соотношениями:

$$\Delta_1 \cup (40/11)\Delta_1 \leftrightarrow f\Delta_1 \cup f(40/11)\Delta_1 = \Delta_3 \cup (40/11)\Delta_3, \quad (7.10)$$

где $f(40/11)f^{-1} = (40/11)$, f - автоморфизм спирали из тетраблоков. Преобразование $(40/11)\Delta_i$ определяет спиральное вращение стартового тетраблока на угол $\phi=99^\circ$ со сдвигом на $11H/40$ вдоль оси локального цилиндра радиуса R , которое переводит его в тетраблок, граничащий с исходным по общей грани. Преобразование f , заменяющее каждый Δ_1 на Δ_3 , сохраняет спираль из тетраблоков и приводит лишь к замене черных вершин на темно-серые, и наоборот. Таким образом, соотношения (7.9) - (7.10) определяют топологически устойчивую спираль с параметрической осью 40/11 из тетраблоков. Подчеркнем, что пустой центральный канал радиуса $0,04R$ (рис.7.7b) соответствует требованию [291] для плотноупакованных спиралей.

В рассматриваемом случае условные центры атомов (клластеров), совпадающие с вершинами тетраблоков, образуют систему точек на пространственной кривой – спирали. Ближайшая к исходной точке $r_1=R; 0; 0$ точка спирали $r_2=R\cos\phi; R\sin\phi; H(\phi/360)$ может быть получена посредством вращения по окружности радиуса R на угол ϕ и смещения на $H(\phi/360)$, где H – шаг спирали. Расстояние между этими точками $L = (2R^2 - 2R^2\cos\phi + (H(\phi/360))^2)^{1/2}$.

Целесообразно рассмотреть далее структуру реальной полипептидной цепи (α -спирали) [219, 220, 223]; кратко она уже была обсуждена в главе 2 (раздел 2.7.3.2).

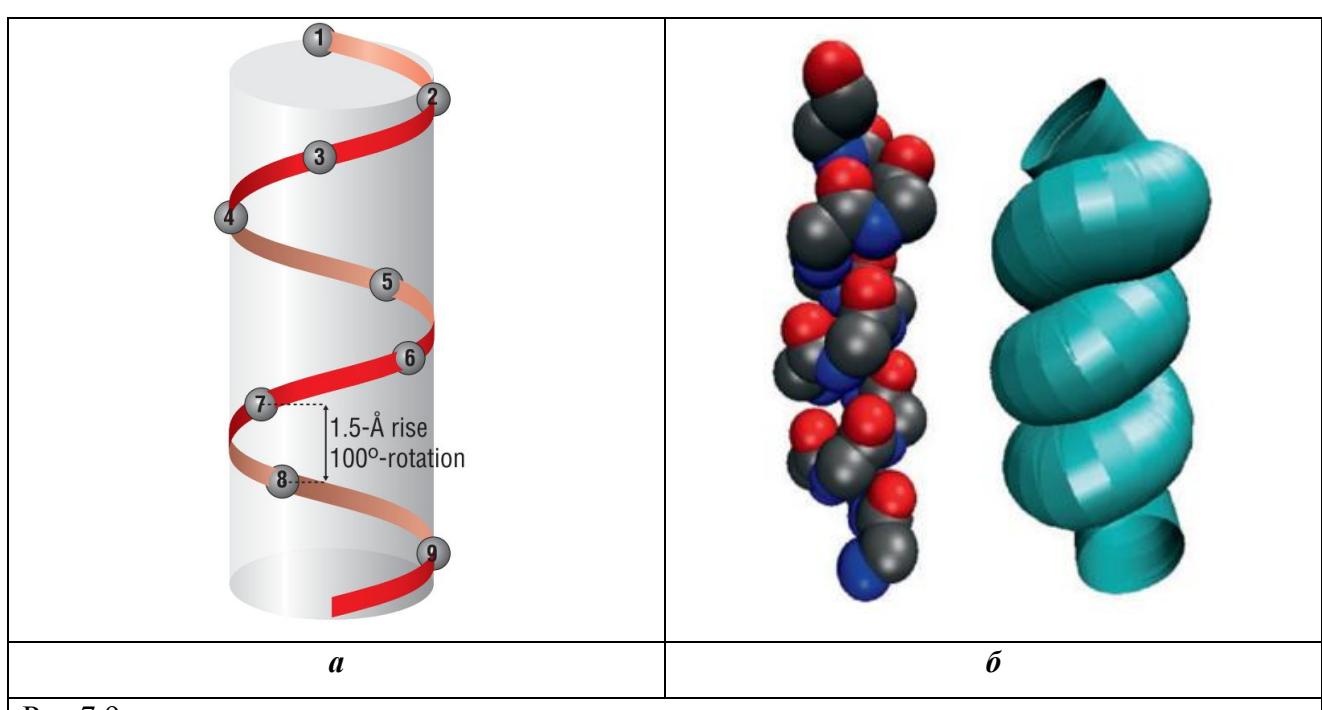
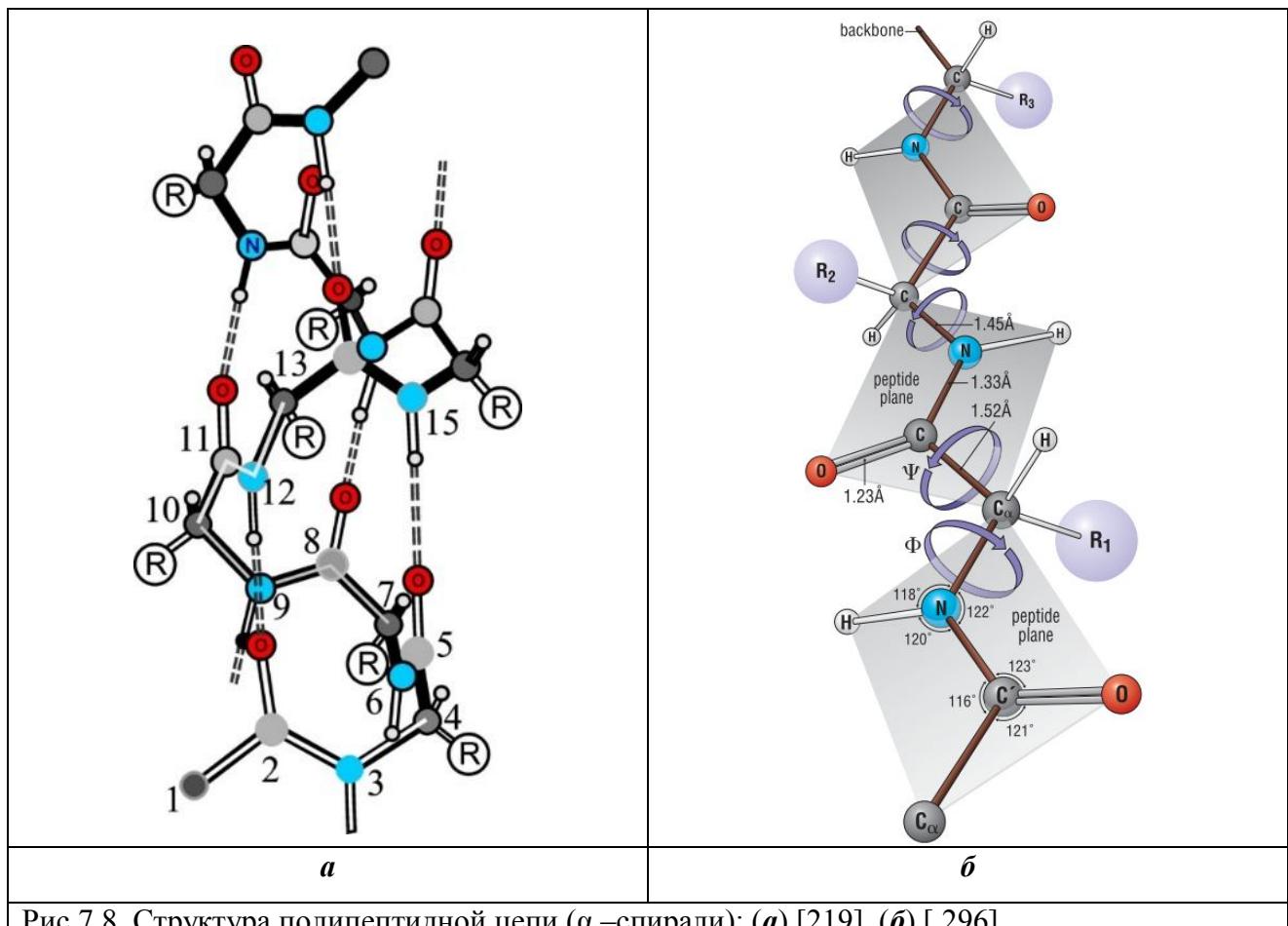
7.5. Структура α -спирали

Полипептидная цепь – это цепь последовательно соединенных между собой пептидов (аминокислот) [219, 220, 223]. Хорошо известно, что химические свойства полипептидов зависят от их пространственной конфигурации (конформации), причем нарушение последней может существенно повлиять на эти свойства. Изменение конформации белков клеток живого организма иногда является причиной тяжелых болезней (например, коровьего бешенства).

Каждый пептид состоит из так называемого альфа-углерода C_α , к четырем валентным связям которого крепятся аминогруппа NH_3 (“азотистый конец”), карбоксильная группа $COOH$, содержащая еще один атом углерода C (“углеродный конец”), водород H и так

называемый аминокислотный остаток (или радикал) R. Разные аминокислоты различаются именно радикалами. Два пептида соединяются друг с другом в бипептид следующим образом: аминогруппа одного взаимодействует с карбоксильной группой другого, выделяется вода и возникает так называемая пептидная связь между углеродом и азотом. У полученного бипептида снова есть “азотистый конец” и “углеродный конец”, поэтому процесс может продолжаться. Цепочка атомов вида $\text{NC}_\alpha\text{C} - \text{NC}_\alpha\text{C} - \dots - \text{NC}_\alpha\text{C}$, где черточки соответствуют пептидным связям, и образует пептидный остов белка (рис.7.8). Химические связи вдоль пептидного остова считаются наиболее сильными и устойчивыми, расстояния между соседними атомами – почти постоянными.

Считается установленным, что шестерки атомов $(\text{C}_\alpha)_i - (\text{C}_i - \text{O}_i) - (\text{N}_{i+1} - \text{H}_{i+1}) - (\text{C}_\alpha)_{i+1}$ (здесь индексы i и i + 1 обозначают номер пептида в цепочке, а атомы кислорода и водорода крепятся к стоящим с ними в одних скобках атомам углерода и азота из пептидного остова, соответственно), расположены в одной плоскости. Эта шестерка атомов формирует так называемую пептидную группу P_{ii+1} , которая образуется за счет возникновения пептидной связи между C_i и N_{i+1} . Итак, последовательные аминокислоты стыкуются друг с другом по пептидным связям, образуя на каждом таком стыке (почти плоскую) пептидную группу (рис.7.8). Последовательные пептидные группы стыкуются по общим альфа-углеродам. При этом плоскость пептидной группы P_{i+1i+2} можно получить из плоскости группы P_{ii+1} двумя последовательными поворотами вокруг оси связей $\text{N}_{i+1} - (\text{C}_\alpha)_{i+1}$ и $(\text{C}_\alpha)_{i+1} - \text{C}_{i+1}$. Углы этих поворотов называются торсионным углами. Принято считать, что именно за счет изменения торсионных углов меняется геометрия белковой молекулы [295]. Между пептидными амидной i-ой и карбонильной (i+4)-ой группами остатков возникают стабилизирующие α -спираль водородные связи (рис.7.8a). Средняя длина α -спирали составляет 11 остатков, что приблизительно равно 17 Å [219]. Структура α -спирали для атомов C_α представлена на рис.7.9.



7.5.1. Структурные параметры α -спиралей, входящей в спираль из α -спиралей (суперспираль)

Крик [221] назвал пучок взаимно обвивающих друг друга спиралей спиралью из спиралей (суперспиралью). Суперспирали являются широко распространенными частями белков, выполняющие многочисленные биологические функции. Такая спираль из спиралей (суперспираль) может содержать 2, 3 или 4 почти параллельно идущие α -спиралей (рис.7.10, рис.7.11, рис.7.12).

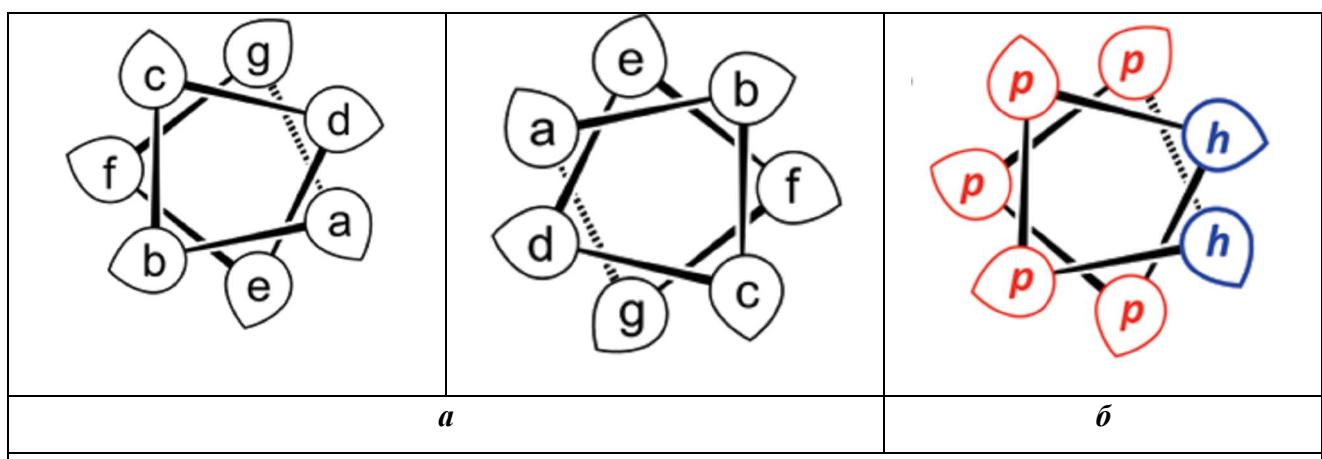
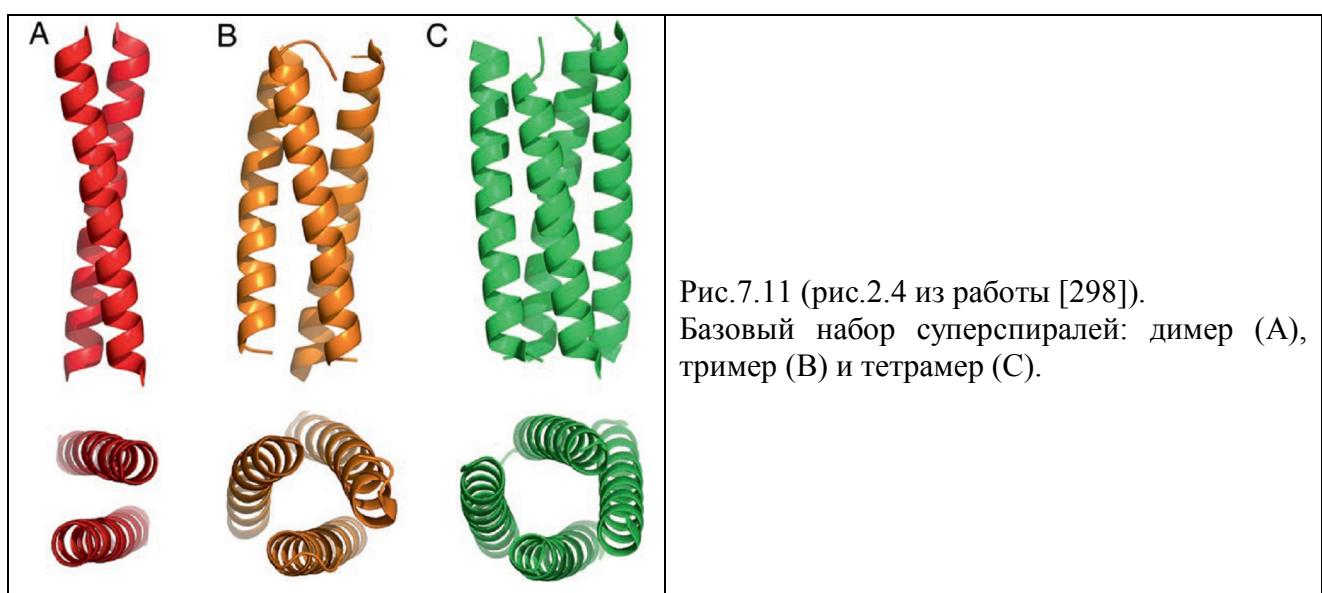


Рис.7.10. Фрагмент рис.2.2 из работы [298]. Взаимодействие α -спиралей в суперспиралях.
(*a*) Классическая двойная спираль из α -спиралей (суперспираль), имеющая гептадный период *abcdefg*. Центральный атом C_α каждого остатка представлен “каплей” с точкой, направленной приблизительно к атому C_β .
(*b*) Гидрофобные (*h*) и полярные (*p*) остатки для классической суперспирали (***a***). Для всех спиралей число остатков на виток составляет 3.5, а не 3.6 для стандартной α -спирали.



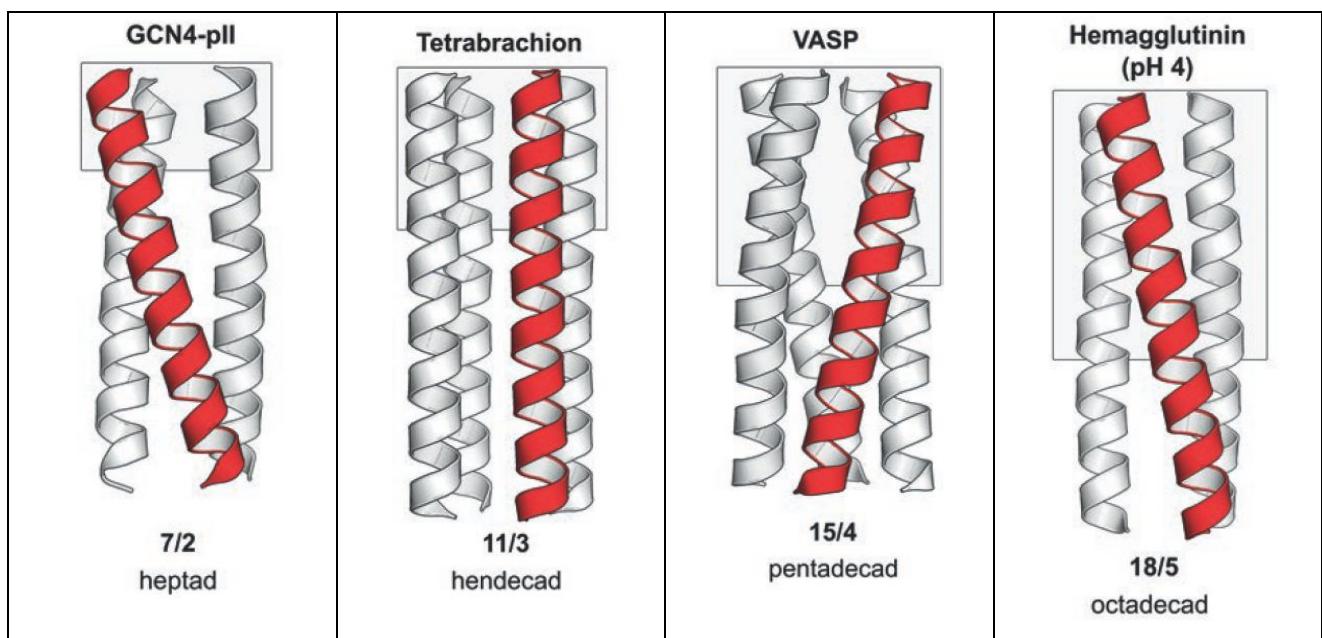


Рис. 7.12. Структуры суперспиралей с различной периодичностью (рис. 4.5 из [299]). Левая суперспираль GCN4-pII (PDB: 1GCM) с периодичностью в семь остатков на два витка спирали (7/2), прямые спирали Tetrabracoion (PDB: 1FE6) с периодичностью 11/3 и правая суперспираль человеческого VASP (PDB: 1USD) с периодичностью 15/4; левая суперскрученная спираль с периодичностью 18/5 в Hemagglutinin (pH 4) (PDB: 1HTM). В скобках приведены номера структур в protein data bank (PDB, базе данных для белков).

Каждая из рассмотренных в этих работах нецелочисленных винтовых осей α -спиралей определена посредством спирали, которая характеризуется дробью m , определяемой отношением числа N остатков, к числу q витков, содержащих эти остатки. Угол вращения такой спирали задается делением 360° на $m = N/q$. Оси α -спиралей, входящие в суперспираль (например, 11/3, 18/5, 25/7...), ограничены “сверху” и “снизу” значениями $15/4 = 3.75$, $7/2 = 3.5$, которые были предложены Полингом [220] и Криком [221].

7.5.2. Эталонное для α -спирали отношение числа остатков на виток

Согласно теоретическим и экспериментальным данным, идеальная одиночная (не входящая в суперспираль) α -спираль характеризуется отношением числа остатков на виток, равным 3.63. Это значение является “Рубиконом”, т.к. значения $m > 3.63$ определяют правую закрутку спирали из α -спиралей, а значения $m < 3.63$ – левую [168, 300], (рис. 7.13).

В работе [301] среднее значение m было определено равным $m=3.64$. В работе [302] параметр $m = 3.63$ был предложен в качестве стартового при построении моделей

суперспиралей, содержащих 2, 3 или 4 параллельно идущих α -спирали. Параметр $m=3.(63)$, определяет угол вращения α -спирали, равный 99^0 ; он совпадает со средним значением для α -спирали (по базе данных, содержащей 1131 α -спираль в различных белках [218]).

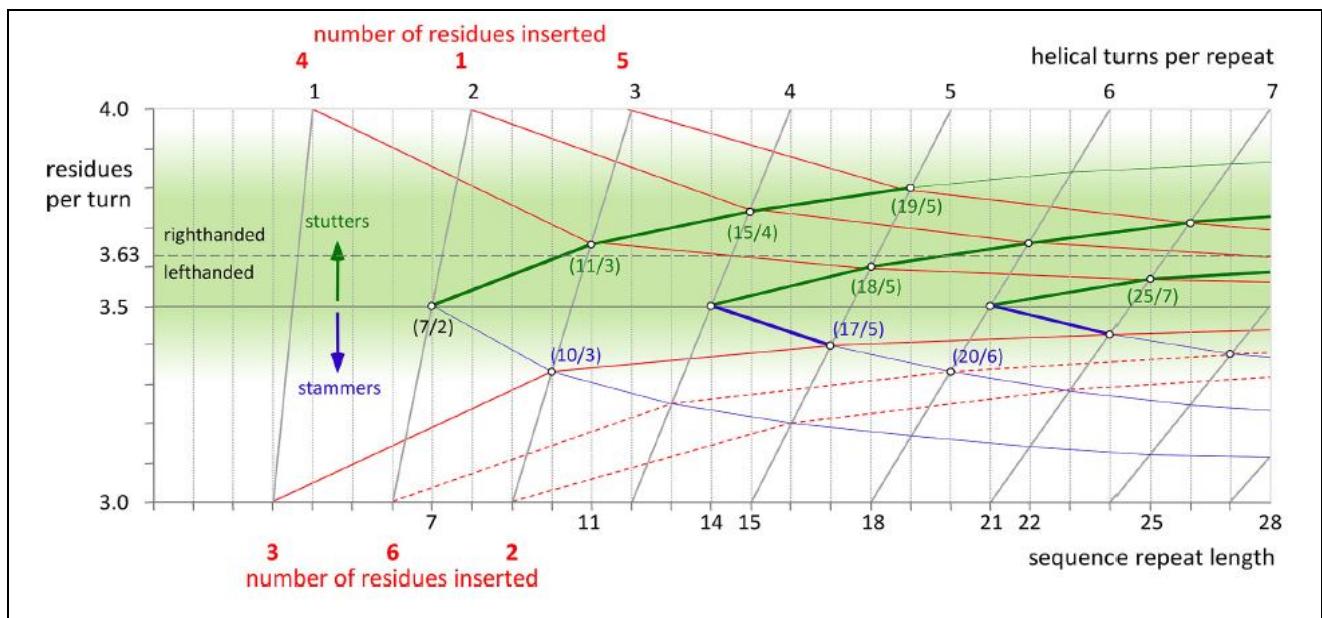


Рис.7.13 [168].

Смены периодичности α -спиралей, входящих в суперспираль, вызванные вставками от одного до шести остатков в гептадный период. Зона, окрашенная зеленым цветом, обозначает предполагаемые границы периодичности, доступные для α -спиральных суперспиралей. Они сосредоточены вокруг периодичности невозмущенных спиралей, около 3.63 остатка на виток. Более высокие значения, чем 3.63, приводят к правому, а более низкие значения к левому суперскручиванию. Эффекты последовательных вставок (3 остатка или 4 остатка) в гептадную структуру показаны синими и зелеными линиями, соответственно. Красные линии соответствуют вставке от 1 до 6 остатков в периодичность гептад и их постепенной делокализации над соседними гептадами. Например, вставка из 4 остатков размещается как 11 (7+4) остатков за 3 витка (11/3), когда делокализована одна гептада, или как 18/5 (2·7+4)/5, когда делокализованы две. Вставки из 1 или 5 остатков должны быть делокализованы на две гептады, что приводит к периодичности 15/4 или 19/5.

Отметим, что при этом ни в одной из этих обзорных структурно-биологических работ, указывающих на фундаментальность значения m , $3.63 < m < 3.64$, эта величина не была определена структурно и симметрийно. Иными словами, не определена винтовая ось $N/q = m$, которая является эталонной для других осей, рассматриваемых как некие (обладающие меньшей симметрией) отклонения от нее. Кристаллохимическим аналогом данной ситуации можно считать трактовку в качестве эталона плотнейших кубических и гексагональной упаковок, отклонениями от которых являются различные неорганические кристаллы. Однако, в отличие от структурной биологии, кристаллохимия начинается с определения структур ГЦК, ГПУ и их симметрии.

7.5.3. Спираль тетраблоков с винтовой осью 40/11 как идеальная модель α -спирали

Согласно экспериментальным данным для α -спирали [168, 218], $R_{\text{эксп}} = 2.3 \text{ \AA}$, $H_{\text{эксп}} = 5.413 \text{ \AA}$, $H_{\text{эксп}}/R = 2.3535$, где $H_{\text{эксп}}$ – экспериментальное значение шага спирали, $R_{\text{эксп}}$ – экспериментальное значение радиуса. Из соотношения $H_{\text{эксп}}/2\pi R_{\text{эксп}} = \tan\theta_{\text{эксп}}$ получаем шаговый угол для α -спирали $\theta_{\text{эксп}} \approx 20.535^\circ$. Среднее значение угла ϕ вращения α -спирали (усредненное по 1132 экспериментальным данным [218]) есть $\phi_{\text{эксп}} = 99^\circ$. Расстояние между атомами $C_\alpha - C_\alpha$ равно 3.80 \AA . Стабилизация α -спирали осуществляется водородными связями между пептидными амидной i -ой и карбонильной ($i+4$)-ой группами остатков, что выражается характеризующим ее соотношением $i \rightarrow i+4$, означающим наличие 4-х эквивалентных цепочек таких связей. Экспериментально наблюдаемая средняя длина α -спирали соответствует 11 остаткам [168, 218].

Было показано [78, 84], что если в каждом правильном тетраэдре тетраблочкой спирали (рис.7.7a) несколько изменить длины 2-х ребер из 6-ти (так, что разница со средним значением для каждого ребра составит величину $\sim 2\%$), то центры таких тетраблоков образуют спираль с осью вращения 40/11 (угол $\theta = 99^\circ$, рис.7.6a) и отношением шага к радиусу $H/R = 2\pi/\tau^2 = 2.4$ (где τ – “золотое сечение”, $\tau = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618$). Данная спираль, которую будем называть идеальной (математической) α_0 -спиралью, подробно рассмотрена в предшествующих разделах главы. Для подтверждения того, что α_0 -спираль является идеальным прототипом α -спирали, сопоставим основные структурные параметры α_0 -спирали и α -спирали:

- 1) отношение H/R шага спирали к радиусу: $2\pi/\tau^2 = 2.4$ и 2.35 , шаговый угол: 20.9° и 20.5° ;
- 2) ось спирального вращения: 40/11 (вращение на 99°) и традиционная в литературе 36/10 (вращение на 100°);
- 3) определяемое по формуле $L = (2R^2 - 2R^2 \cos\phi + (H(\phi/360))^2)^{1/2}$ расстояние $C_\alpha - C_\alpha$: 3.81 \AA и 3.80 \AA ;
- 4) соотношение $i \rightarrow i+4$, определяющее расположение водородных связей в α -спирали, – это реализация для α_0 -спирали соотношения $(40/11)^4 = 10_1$, которое означает совмещение i -го и $i+4$ -го атомов C_α вращением на $36^\circ = 36^\circ + 360^\circ = 396^\circ = 99^\circ \cdot 4 = 360^\circ/10$ и сдвигом вдоль оси α -спирали;
- 5) винтовая ось 40/11 за 10 оборотов ($(40/11)^{10} = 4_1$) связывает 11 остатков так, что одиннадцатый остаток смещается относительно первого на $-90^\circ = 10 \cdot 99^\circ - 2 \cdot 360^\circ$. Поэтому

экспериментально наблюдаемая средняя длина α -спиралей из 11 остатков определяется разбиением 40 вершин α_0 -спиралей на четыре 11-вершинных подмножества, каждое из которых пересекается с соседним по общей вершине.

Для наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках «относительные максимумы для длин из 7, 11 и 15 остатков, отвечают 2, 3 и 4 виткам» [219]. Они могут рассматриваться как разбиение $40 = 7+7+11+15$ вершин (атомов C_α) α -спиралей на циклы из 2, 2, 3 и 4 витков. Подструктуры, соответствующие таким циклам, могут быть охарактеризованы осями $7/2$, $7/2$, $11/3$, $15/4$, что позволяет определить ось $40/11$ в следующем виде: $(7+7+11+15) / (2+2+3+4)$. При размещении 5 вершин на одном витке можно перейти к разбиению 40 вершин на 5 минимальных циклов $7/2$ и один гипотетический цикл $5/1$: $40/11 = (7+7+7+7+5) / (2+2+2+2+1)$. Постоянство угла спиралей требует, чтобы на двух витках число вершин различалось не более чем на 1, поэтому к циклу $5/1$ необходимо добавление 2 вершин. Это позволит заменить его циклом $7/2$ и перейти к оси $42/12 = 7/2$, содержащей, как и $40/11$, только экспериментально наблюдаемые 4 и 3 атома C_α на витке. В отличие от глобулярных α -белков, длины α -спиралей в фибриллярных белках геометрически не ограничиваются, поэтому симметрийно допустимым является переход от спиралей $40/11$ к более длинной спирали $42/12$, состоящей из шести спиралей $7/2$. Такой переход может объяснить “базовую” периодичность $7/2$ для α -спиралей в суперспиралах (рис.7.10 – рис.7.13).

Приведенные данные подтверждают, что для атомов C_α определенная нами α_0 -спираль является идеальным прототипом α -спиралей. Покажем, что она является идеальным прототипом для всей α -спиралей, т.е. определяет (с допустимой погрешностью) атомы α -спиралей C_α , C' , N , O и H , расположенные в пептидной плоскости.

Все стартовые атомы α -спиралей C_α , C' , N , O и H расположены в одной (пептидной) плоскости. Плоскостью симметрии обладает только плоский тетраблок Δ_3 , поэтому для соотнесения атомов пептидной плоскости с некоторыми симметрийно-выделенными точками тетраблока, необходим переход по (7.10) от спиралей из тетраблоков Δ_1 к спиралей из тетраблоков Δ_3 . В данном случае два соседних атома C^1_α и C^2_α – две вершины диагонали пентагона в экваториальном сечении тетраблока Δ_3 . Для простоты будем считать этот пентагон правильным, тогда при единичном ребре пентагона диагональ делится на 3 части: τ^{-1} , τ^{-2} и τ^{-1} . В спирале тетраблок Δ_3 составляют две пары тетраэдров из двух соседних тетраблоков Δ_1 , при этом общая плоскость пары тетраэдров из Δ_1 пересекает экваториальную плоскость Δ_3 по биссектрисе угла пентагона. Две соседние тетраблоки объединяются локальной двойной осью, поэтому искомые позиции атомов полипептидной цепи должны

определяется разбиением пентагона, симметричным относительно двойной оси, проходящей перпендикулярно середине диагонали $C_{\alpha}^1 - C_{\alpha}^2$.

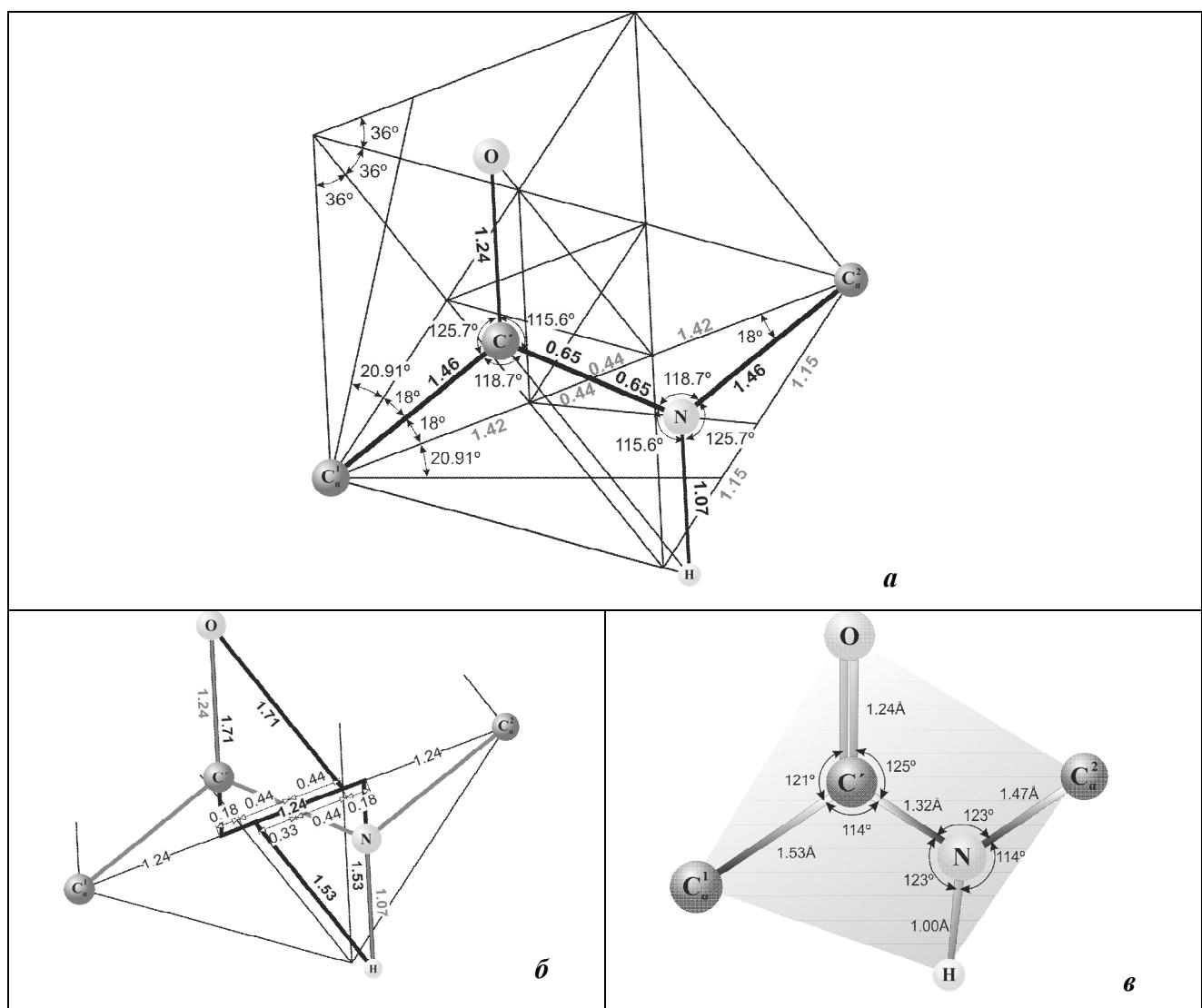


Рис.7.14.

- (а) Размещение атомов пептидной плоскости α -спирали в особых точках правильного пентагона. Длины соединяющих атомы ребер указаны в ангстремах. Ребра $C_{\alpha}^1 - C'$, $C' - N$ и $N - C_{\alpha}^2$ симметричны относительно середины диагонали пентагона, C' и N - расположены в центрах тяжести (пересечениях медиан) золотых треугольников со сторонами 2.3.
- (б) Размещение атома О в вершине «золотого треугольника с серебряным основанием», равным $1.06 = 2.3 \tau^{-2}$ ($1 + \sqrt{2}$). Продолжения ребер О - C' и H - N делят диагональ пентагона на 3 части, ребро $C' - O$ равно трети диагонали. Атом H находится в вершине золотого треугольника, основание которого делится на части в соотношении $\approx 1:2$.
- (в) Экспериментальные расстояния и углы в пептидной плоскости α -спирали [84].

Вписывание пентаграмм в правильный пентагон - построение пифагорейской пентаграммы, позволяет выделить удовлетворяющие указанным условиям равнобедренные золотые треугольники с углом 36^0 между единичными сторонами (рис.7.14а). При размещении в центрах тяжести таких треугольников атомов C' и N получаем

симметризированный участок полипептидной цепи, в котором (при ребре пентагона, равном радиусу спиралей $R=2.3 \text{ \AA}$) расстояния $C^2_\alpha - N$, $N - C'$ и $C^1_\alpha - C^2_\alpha$ совпадают с экспериментальными, а расстояние $N - C^2_\alpha$ равно $C^1_\alpha - C$.

Атом О находится в вершине золотого треугольника с «серебряным основанием». Такое основание состоит из частей, составляющих $\tau^{-2}/2$, $\tau^{-2}/2$ и $(\tau/3 - \tau^{-2})/2$ диагонали пентагона, а отношение $\tau^{-2}/2 : (\tau/3 - \tau^{-2})/2 = 3\tau/2 \approx (1+\sqrt{2})$ определяет серебряное сечение. Расстояние $C' - O$ равно $\tau/3$. Атом H находится в вершине золотого треугольника, основание которого делится на части в соотношении 1:2. Расстояние $N - H$ равно $(1+\sqrt{2})\tau^{-2}/2$. Экспериментальное расстояние $N - C^2_\alpha$ меньше, чем $C^1_\alpha - C'$, что можно поставить в соответствие незначительному отклонению от правильного пентагона в экваториальном сечении тетраблока Δ_3 . Таким образом, положения атомов в пептидной плоскости α -спиралей характеризуются особыми точками пифагорейской пентаграммы экваториального сечения тетраблока Δ_3 (рис.7.14б,в).

Приведенные на рис.7.14 геометрические факторы показывают, что сопоставление длин электронных связей с геометрическим параметром тетраблока - единичным ребром, задает условие устойчивости α -спиралей. Угол между диагональю пентагона $C^1_\alpha - C^2_\alpha$ и горизонталью составляет 20.91° . Отложив угол 20.91° симметрично относительно линии $C^1_\alpha - C'$, получим характеризующий развертку α_0 -спиралей на рис.7.6а угол $18^\circ + 18^\circ + 20.91^\circ = 56.91^\circ$ между C^1_α и C^5_α . Отметим, что угол между $C^1_\alpha - C^2_\alpha$ и горизонталью равен 18° (что естественно для пифагорейской пентаграммы), и он совпадает с шаговым углом максимально плотноупакованной спирали, определенным в [291].

7.6. Модели объединения α -спиралей в глобулярных белках как реализации конструкций алгебраической геометрии

Известно, что белковая цепь упакована плотно [223]: «И упаковки, и мотивы укладки цепи в белковую глобулу сосредотачивают наше внимание не просто на всевозможных (рыхлых, ажурных и т.п.) комплексах из структурных сегментов, а лишь на тех, где они, эти структурные сегменты, уложены плотно». Укладки α -спиралей в глобулярных α -белках описываются при помощи модели квазисферических многогранников [303], отображающей расположение α -спиралей вокруг шарового ядра глобулы. В этой модели α -спиралей – аппроксимируются спиральями, которые окружают ядро, а их полярные концы должны находиться на поверхности глобулы. Такая упаковка спиралей моделируется квазисферическим многогранником, каждая вершина которого соответствует половине

цилиндра. При этом данному числу спиралей отвечает один многогранник, а нескольким (от двух до десяти) типам укладок соответствуют различные размещения осей спиралей на ребрах этого многогранника [303].

На рис. 7.15 α (это рис. 14-3 из [223]) представлена типичная упаковка трех α -спиралей (ход петель прослежен очень грубо) в глобулярном белке. Идеализированная упаковка этих спиралей рис. 7.15 δ (это рис. 14-4 из [223]) достигается при их замене тремя цилиндрами, оси которых расположены по трем непересекающимся ребрам октаэдра, охватывающим все его 6 вершин. В общем случае модель укладки n одинаково длинных α -спиралей в глобулярных α -белках сводится к выбору определенной системы n цилиндров с осями по n ребрам, охватывающим все $2n$ вершин, $n = 3, 4, 5, 6$ квазисферического многогранника [303].

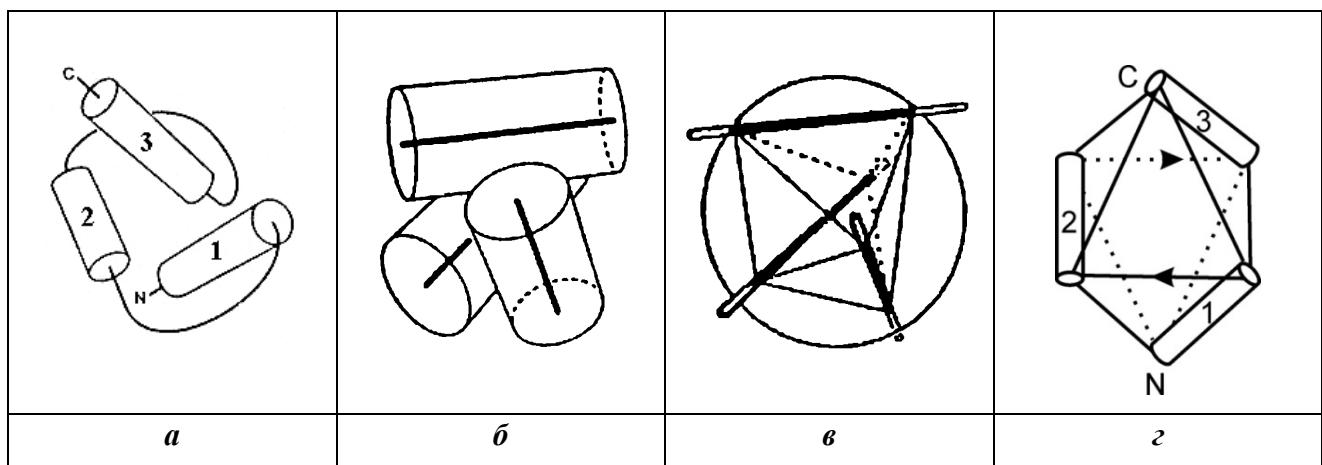


Рис. 7.15.

- (α) Типичная упаковка α -спиралей в глобулярном белке, моделирующая N-концевой домен актинидина (рис. 14-3 из [223]).
- (δ) Упаковка трех цилиндров, аппроксимирующих α -спирали (рис. 14-6а из [223]).
- (ϵ) Показанные черным части осей цилиндров (рис. δ) лежат внутри сферы, описанной вокруг октаэдра. Они совпадают с ребрами октаэдра (рис. 14-6б из [223]).
- (γ) Размещение цилиндров на ребрах октаэдра, моделирующее N-концевой домен актинидина, стрелки указывают ход соединяющих α -спирали петель (рис. 14-4 из [223]).

Квазисферические многогранники [303] представляют собой многогранники пустоты Бернала, введенные им в статье [235] с весьма актуальным и сегодня названием «О роли геометрических факторов в структуре материи». При размещении в их вершинах центров шаров радиуса R шар, который может быть помещен в центр многогранника, обладает радиусом меньше R , что определяет пустоту в центре многогранника. Полиэдры Бернала с 6 и 12 вершинами - это октаэдр и икосаэдр [235]. В работе [9] эти равнореберные триангулированные полиэдры были определены как результат введения вдоль осей икосаэдра дисклиниаций, взаимодействие которых определялось таблицей умножения группы

Y' единичных кватернионов. Группа Y' – подгруппа группы симметрии политопа $\{3,3,5\}$ [24].

В свою очередь, политоп $\{3,3,5\}$ определяется 8-мерной решеткой E_8 – прафазой для тетраэдрических (плотноупакованных) и тетракоординированных (алмазоподобных) структур. Первую координационную сферу E_8 образуют 240 векторов, соответствующих вершинам полурегулярного политопа Госсета $\{4_{21}\}$. Они могут быть разбиты на 10 непересекающихся подмножеств, каждому из которых сопоставляется 24-вершинный политоп $\{3,4,3\}$, “центрированный” одной из 10 вершин политопа $\{3,3,3,4\}$ – аналога октаэдра в E^5 [25, 26]. Десять вершин $\{3,3,3,4\}$ можно считать точками базы, каждая из которых в единой составной конструкции нагружена своим 24-вершинным слоем. Данная конструкция представляет собой дискретный вариант расслоения Хопфа $S^7 \rightarrow S^4$ (слой S^3), в котором $\{4_{21}\}$, $\{3,3,3,4\}$ и $\{3,4,3\}$ принадлежат n-мерным сферам S^7 , S^4 и S^3 соответственно. Вершины политопа $\{3,4,3\}$, в свою очередь, можно рассматривать как дискретный вариант расслоения Хопфа $S^3 \rightarrow S^2$ (слой S^1), в котором базу образуют находящиеся на сфере S^2 вершины октаэдра $\{3,4\}$, а слой составляют находящиеся на окружности S^1 вершины квадрата $\{4\}$ (рис.7.16a). Объединив рассмотренные выше варианты расслоений Хопфа, получим:

$$\begin{array}{ccccccc}
 E^8 & \supset & S^7 & \rightarrow & S^4 & \quad E_8 & \supset \{4_{21}\} \\
 & & \downarrow & & & & \downarrow \\
 & & S^3 & \rightarrow & S^2, & \quad \{3,4,3\} & \rightarrow \{3,4\} \\
 & & \downarrow & & & & \downarrow \\
 & & S^1 & & & \{4\} & , \\
 \end{array} \tag{7.11}$$

где символ слоя расположен под идущей вниз стрелкой [24, 25, 100].

Объединение слоёв в единый составной объект достигается конструкцией гладкого расслоения, включающей в себя пространство расслоения, базу, гладкое отображение расслоения в базу, слой F , структурную группу G преобразований слоя, структуру расслоения. Если задана реализация группы G в виде группы гладких преобразований отличного от F слоя F' , можно построить расслоение со слоем F' , называемое ассоциированным с главным [15].

Схема расслоения Хопфа для политопа $\{3,4,3\}$ показана на рис.7.16a. Каждая из 6 вершин $\{0, \infty, \pm 1, \pm i\}$ базы – октаэдра, нагружена 4 точками слоя, лежащими на одной окружности. Каждая точка слоя определяется кватернионом, задаваемым парой комплексных чисел: $(\pm 1, 0)$, $(0, \pm 1)$, $(\pm i, 0)$, $(0, \pm i)$, $1/2(\pm 1 \pm i, \pm 1 \pm i)$ и соответствующей ему вершиной базы.

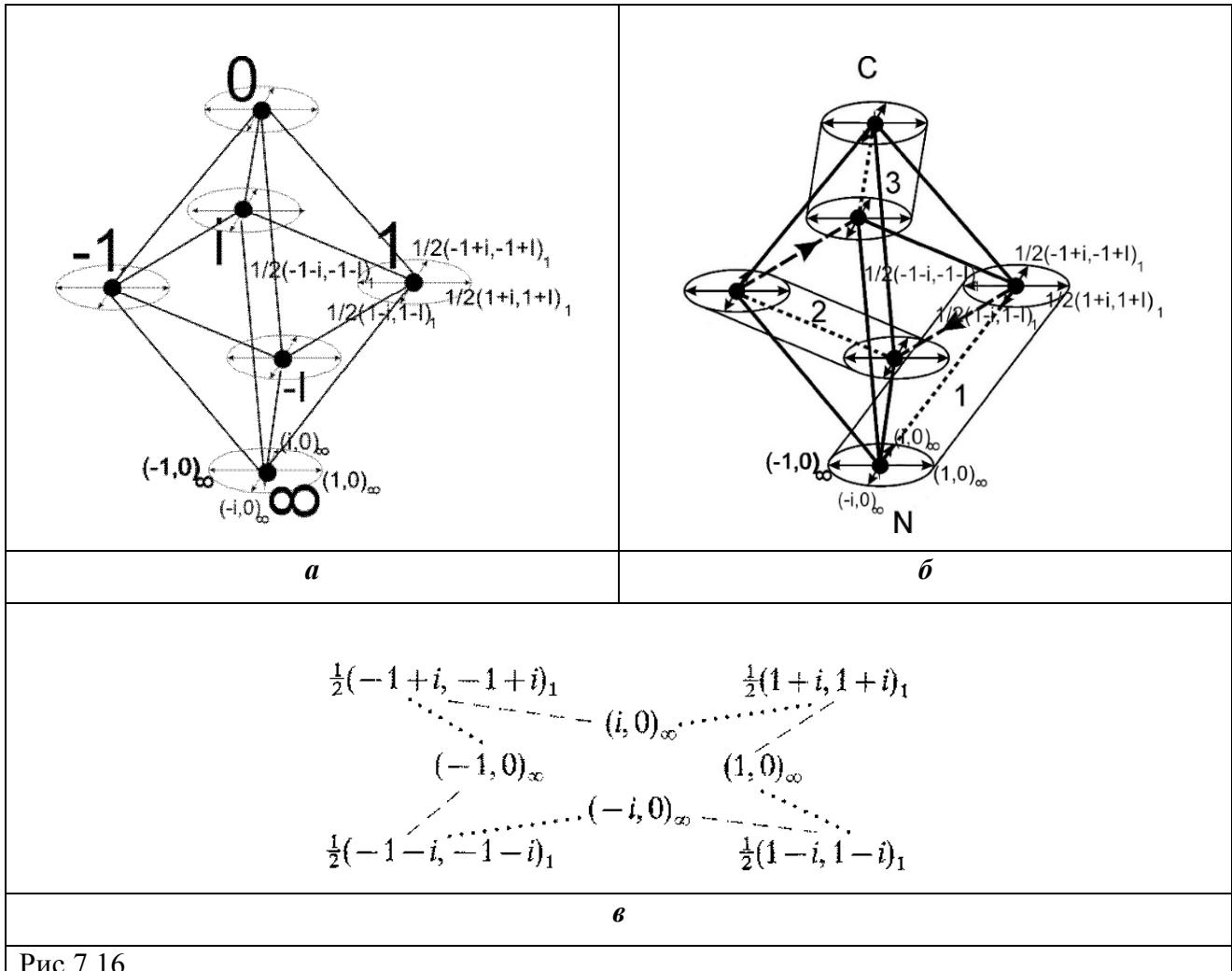


Рис.7.16.

- (а) Схема расслоения Хопфа для политопа $\{3,4,3\}$. Каждая из 6 вершин $\{0, \infty, \pm 1, \pm i\}$ октаэдра (базы) нагружена 4 точками слоя - вершинами квадрата.
- (б) Ребро октаэдра, совпадающее с осью цилиндра, определяет связность квадратов вокруг его концов по «пунктирному» закону, ребро между цилиндрами – по «штриховому» (рис. в).
- (в) Связность расслоения связывает точки слоя вершины ∞ с точками слоя вершины 1 либо по «пунктирному», либо по «штриховому» закону.

Связность расслоения ставит в соответствие вершине соседние вершины в пространстве расслоения (рис.7.16в). Для каждой точки слоя в рассматриваемом расслоении существуют 8 соседних точек. Например, для точки $(1,0)_\infty$ ближайшими будут по 2 точки из слоев $1, -1, i, -i$, но не существует ближайших к ним точек в слоях ∞ и 0. В частности, для точки $(1,0)_\infty$ ближайшими являются точки $1/2(1+i, 1+i)_1$ и $1/2(1-i, 1-i)_1$. Связности при движении по ребру $\infty \rightarrow 1$ октаэдра базы показаны на схеме (рис.7.16в), представляющей собой выражение (3.8) из работы [25]. Согласно схеме, ребра в октаэдре могут быть двух типов: «штриховые», определяющие трансляцию слоя, и «пунктирные», определяющие трансляцию с поворотом на $270^\circ = -90^\circ$ (рис.7.16б). Два слоя, для которых соответствующие им две вершины базы задают ребро октаэдра, можно рассматривать как основания

квадратной призмы; тем самым расслоению сопоставляется объединение 3-х таких призм. Таким образом, расслоение Хопфа для политопа {3,4,3} позволяет определить охватывающую все вершины октаэдра цепь из ребер, в которой чередуются нагруженные квадратными призмами пунктирные ребра и штриховые ребра, соответствующие связям между квадратными призмами (рис.7.16б).

7.6.1. Полиэдры Бернала и оптимальная упаковка на сфере пар кругов максимального углового радиуса

Размещение центров шаров радиуса R по вершинам октаэдра с ребром $2R$ эквивалентно размещению их центров по концам трех ребер, охватывающих все вершины октаэдра. Каждая пара шаров (рис.7.17а), центры которых являются концами такого ребра, находится внутри цилиндра радиуса R и длины $4R$. Перпендикулярные ребрам экваторы шаров можно рассматривать как слои, которыми нагружены их центры-вершины октаэдра. Если экватор шара, в свою очередь, считать базой, нагруженной двумя параллельными ей окружностями радиуса R (вокруг северного и южного полюсов шара), образующими цилиндр высотой $2R$, то от расслоения Хопфа для политопа {3,4,3} можно перейти к ассоциированному с ним расслоению. В таком расслоении вершина базы (октаэдра) сопоставляется центру слоя - цилинду высотой $2R$, а середина ребра октаэдра является центром общего основания двух таких цилиндров (рис.7.17б). Аналогично вышеизложенному, каждый такой цилиндр можно заменить квадратной призмой высотой $2R$, при этом переход от нижнего основания нижней призмы к верхнему основанию верхней призмы должен определять трансляцию с поворотом на -90° (рис.7.16б). Итак, конструкция расслоения, ассоциированного с расслоением Хопфа для политопа {3,4,3}, определяет систему трех пар квадратных призм с общими основаниями на серединах трех ребер (длины $2R$) октаэдра. При этом для общей оси (длиной $4R$) пары призм каждое ребро октаэдра (длины $2R$) является центральной половиной.

Структура α -спирали обладает винтовой осью 40/11 (с вращением на 99°), поэтому 10 оборотов такой оси связывают 11 остатков (рис.7.6а), т.е. экспериментально наблюдаемую среднюю длину α -спирали [219]. При размещении первого остатка α -спирали в вершине $(1,0)_\infty$ нижнего квадрата нижней призмы, соотношение $(40/11)^{10} = 4_1$ определяет размещение одиннадцатого остатка в смещенной относительно нее на $-90^\circ = 10 \cdot 99^\circ - 2 \cdot 360^\circ$ вершине $\frac{1}{2}(1-i, 1-i)_1$ верхнего квадрата верхней призмы. Таким образом, рассмотренное выше расслоение позволяет отображать симметрию и одной α -спирали, и упаковки трех α -спиралей в глобулярном α -белке

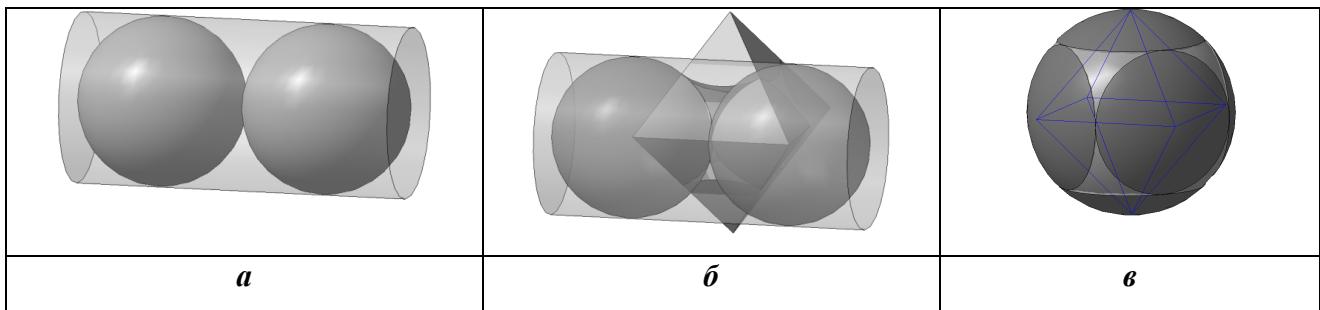


Рис.7.17.

- (*a*) Внутри цилиндра радиуса R и длины $4R$ находится пара шаров радиуса R .
- (*б*) Размещение шаров радиуса R по вершинам октаэдра с ребром $2R$ эквивалентно размещению трех цилиндров (рис.7.15г) по трем ребрам октаэдра. Центры цилиндров и вершины ребер октаэдра совпадают.
- (*в*) Пересечение описанной вокруг октаэдра сферы с тремя парами шаров, находящихся в расположенных по ребрам октаэдра трех цилиндрах (рис. *б*), определяет оптимальную упаковку на сфере трех пар кругов (сферических шапочек) максимального углового радиуса. Границные окружности кругов «нагружают» вершины октаэдра подобно окружностям слоев в расслоении на рис.7.16*а*.

В расслоении Хопфа для политопа $\{3,3,5\}$ базу образуют середины 30 ребер икосаэдра, каждая из которых «нагружена» четырьмя вершинами квадрата (слоя). Аналогично рассмотренному выше, из этого расслоения может быть получена конструкция из шести пар квадратных призм (расположенных вдоль шести ребер икосаэдра, охватывающих все его вершины), аппроксимирующих упаковку шести α -спиралей в глобулярном белке [303].

Пересечение описанной вокруг октаэдра сферы с тремя парами шаров радиуса R , находящихся в расположенных по ребрам октаэдра трех цилиндрах высотой $4R$, определяет оптимальную упаковку на сфере 3 пар кругов (сферических шапочек) максимального углового радиуса (рис.7.17*в*). Такая упаковка определяется решением задачи об оптимальной (плотнейшей) упаковке на сфере 3 пар кругов максимального углового радиуса при сохранении связки кругов в паре. Данная задача является частным случаем задачи об оптимальной упаковке на сфере $n = 3, 4, 5, 6$ пар кругов максимального углового радиуса при сохранении связки кругов в паре [304]. Решение этой задачи сводится к выбору определенной системы n ребер, охватывающей все $2n$ вершин, $n = 3, 4, 5, 6$ полидра Бернала. Все эти ребра принадлежат гамильтонову графу данного полидра, который проходит через каждую вершину полидра ровно по одному разу. На рис.7.15г таким будет граф из чередующихся пунктирных и штриховых ребер, который определяет объединение α -спиралей в единую цепь. На рис.7.18 приведены примеры однозначного соответствия системы ребер квазисферического многогранника, по которой распределены оси α -спиралей [303], системе ребер, определяющей оптимальную упаковку на сфере $n = 3, 4, 5, 6$ пар кругов максимального углового радиуса [304]. Отметим, что сфера, на которой реализуется

упаковка кругов, фактически, и определяет требование максимальной квазисферичности многогранника [303]. Таким образом, оптимальное покрытие сферы парами кругов максимального углового радиуса определяет возможную упаковку π одинаково длинных α -спиралей в аппроксимируемом сферой глобулярном α -белке.

Упаковку кругов на сфере можно рассматривать как расслоенное пространство (расслоение), в котором круги (слои) являются «нагрузкой» для точек базы, образованной центрами кругов (рис.7.17 α).

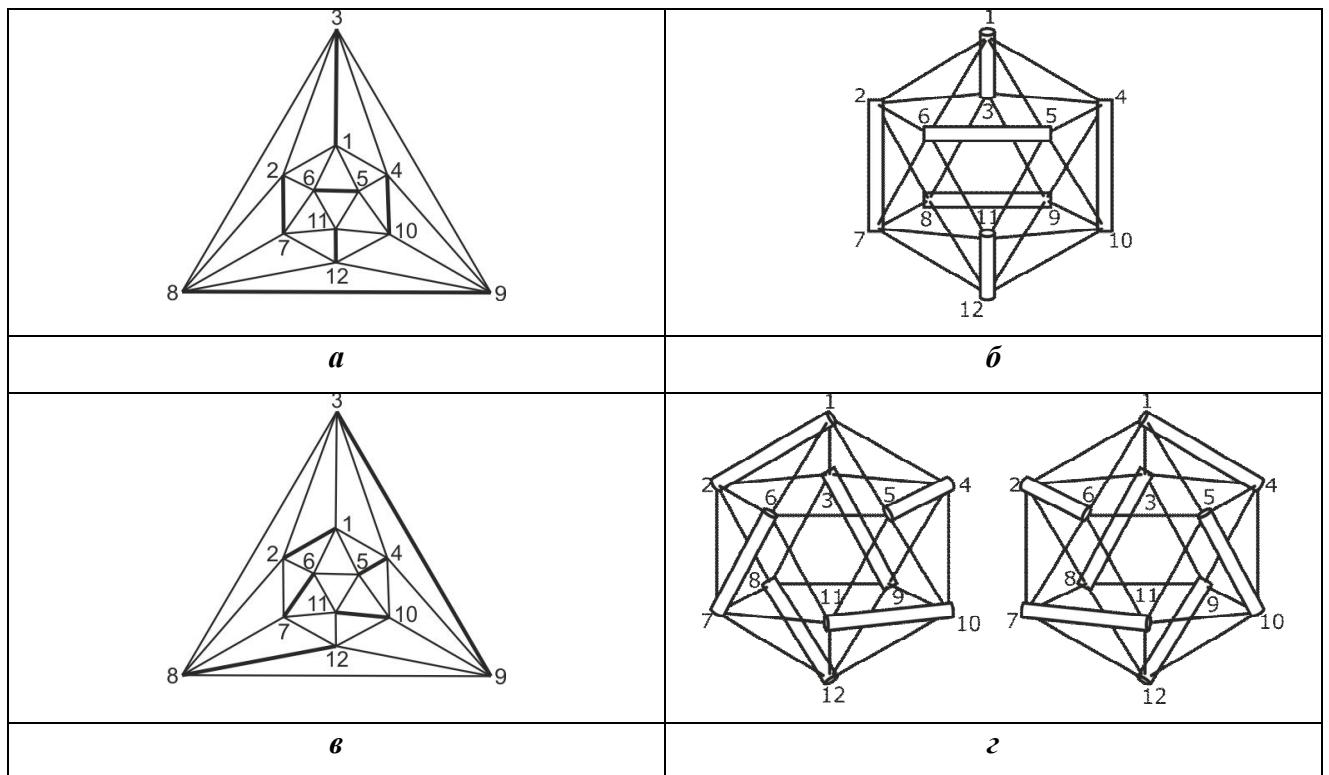


Рис.7.18.

(α), (β) Диаграммы Шлегеля икосаэдра, на которых жирными линиями выделены обладающих симметриями T_h , D_3 системы 6 ребер, охватывающих все вершины. Концы каждого такого ребра – центры кругов максимального углового радиуса, образующихся при пересечении парой шаров сферы (рис.4 из работы [304]).

(β) Совпадающее с (α) размещение цилиндров по ребрам икосаэдра (рис.3 из [303]).

(γ) Правый, совпадающий с (β), и левый варианты размещения цилиндров по ребрам икосаэдра (рис.3 из работы [303]).

Варианты (β), (γ) определяют объединение α -спиралей в суперспирали фибрилярных белков .

Наряду с объединением в шарообразные глобулы, α -спирали могут объединяться в суперспирали α -структурных фибрилярных белков (рис.7.11, рис.7.12). Шарообразность глобулы определялась выбором полидра в качестве базы расслоения, определяющего политоп. В частности, 120 – вершинный политоп $\{3,3,5\}$ можно представить в виде расслоения с 12-вершинным икосаэдром в качестве базы и правильным 10-вершинником в

качестве слоя [24, 174, 222]. Объединение трех 10-вершинных цепей в новый слой, соответствующий спирали Коксетера из правильных тетраэдров (рис.7.2), все 30-вершин которой лежат на поверхности цилиндра [24, 174, 222]), определяет переход от икосаэдра как разбиения сферы на 20 треугольников, к упаковке четырех его треугольников, которые охватывают все его вершины. Центры этих треугольников образуют базу (тетраэдр), которую можно спроектировать в плоский центрированный треугольник – базу ассоциированного расслоения, каждая вершина которой нагружена спиралью Коксетера. Иными словами, от расслоения 4-мерного политопа на 3-мерную базу (икосаэдр) и 2-мерный слой (10-вершинник) переходим к расслоению на 2-мерную базу (центрированный треугольник) и 3-мерный слой (спираль Коксетера). Соответствующее такому расслоению проектирование политопа в E^3 определяет закручивание трех спиралей Коксетера вокруг центральной (рис.7.19 a).

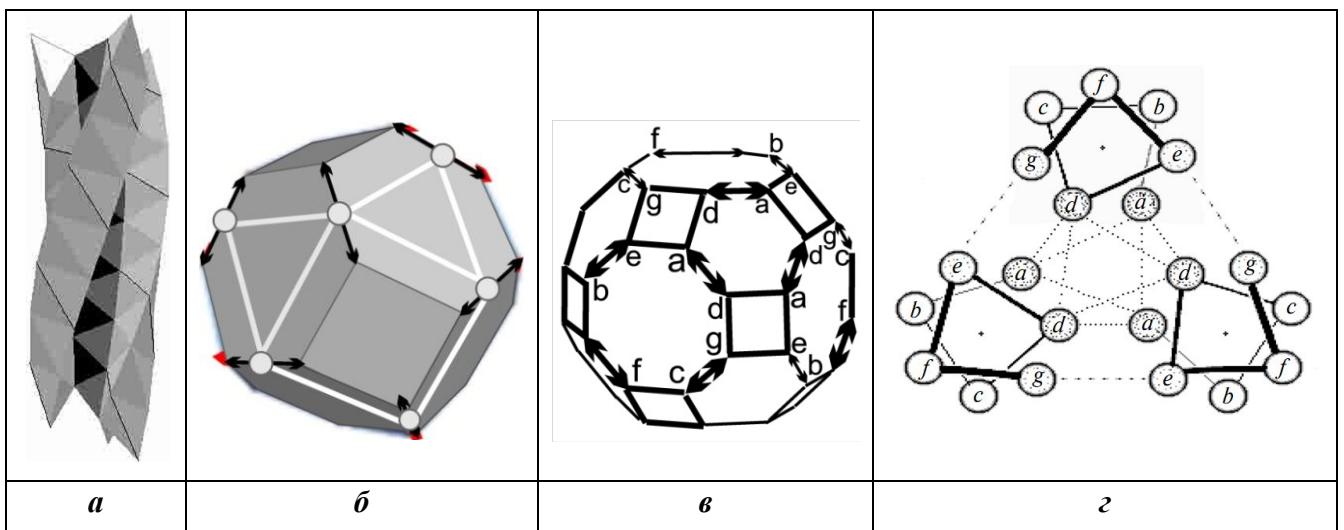


Рис. 7.19.

- (*а*) Закручивание трех спиралей Коксетера вокруг центральной (рис.14а из работы [174]).
- (*б*) Усеченный октаэдр с 6 квадратными и 8 гексагональными гранями как результат раздвоения вершин кубооктаэдра, показанного белыми линиями. Гексагону соответствует ось 30/11, квадрату 40/9, а ребру - 10/1.
- (*в*) Усеченный кубооктаэдр с 6 октагональными, 8 гексагональными и 12 квадратными гранями. Октагону, гексагону, квадрату, ребру соответствуют оси 40/11, 30/11, 40/9, 10/1.
- (*г*) Взаимодействие α -спиралей в тройной суперспирали (вид с торца) - рис.11-3б из [223]. Суперспирали соответствует тройка октагонов вокруг центрального гексагона на рис. *в*).

От 120-вершинного политопа можно перейти к 240-вершинному политопу, который определит закручивание трех 60-вершинных стержней с симметрией 30/11 вокруг такого же центрального стержня с такой же симметрией 30/11. При этом между стержнями 30/11 возникают каналы с симметрией 40/9 (рис.7.19 b). Переход к 480-вершинному политопу определит закручивание трех 80-вершинных стержней с симметрией 40/11 вокруг

центрального канала с симметрией 30/11. При этом центральный канал образован четвертями трех окружающих его стержней 40/11, а между парами стержней 40/11 возникают каналы с симметрией 40/9 (рис.7.19б). Симметрия 480-вершинного политопа задается определяющими соотношениями для осей:

$$(30/11)^3 = (40/11)^4 = -(40/9)^4 = 10_1, \quad (7.12)$$

знак минус определяет хиральность оси 40/9 - противоположную хиральности всех остальных осей [78].

Так как α -спираль обладает осью 40/11, то она соответствует октагональной грани рассматриваемого в качестве базы усеченного кубооктаэдра, а объединение трех октагонов вокруг гексагона (рис.7.19б) должно соответствовать суперспирале из трех α -спиралей, схема которой показана на рис.7.19г. Действительно, внутри тройки α -спиралей, которые характеризуются осями 40/11 и соответствуют октагонам на рис.7.19б, возникает канал 30/11, соответствующий гексагону на рис.7.19б. При этом между парами каналов 40/11 возникают каналы 40/9, которым соответствуют квадраты (рис.7.19б). Аналогичные соотношения, в рамках развивающегося подхода, могут быть получены и для других суперспиралей.

7.7. Заключение

Среди конструкций математической кристаллографии особую роль играют рассмотренные в работе локальные оси, которые входят в класс из 35 параметрических осей, определяемых 8-мерной решёткой E_8 [72]. К этому классу принадлежат оси $10/3 = 3,(3)$ и $30/13 = 2,(307692)$, соответствующие (согласно табл.7.1) числу остатков на виток 3.3 и 2.3 в спирали коллагена (в волокнах) и скрученной β -структуре. Таким образом, для базовых спиральных биополимеров решётка E_8 априори определяет локальные параметрические оси, подобно тому, как кристаллическая решётка определяет возможные винтовые оси кристаллов. Однако не все из них являются топологически устойчивыми, что определяет, например, неустойчивость 3_{10} -спирали и гипотетичность π -спирали. Сопоставлению теоретических (наших и работы [291]) и экспериментальных [219] данных для спиралей полипептидных цепей посвящена таблица 7.1. В настоящее время, структурная классификация белков, преимущественно, основана на биоинформатике, которая использует возможности компьютерного перебора и позволяет непосредственно сопоставлять белки [223]. Применяемый нами аппарат позволяет до реальных или компьютерных экспериментов

выявлять симметрийные закономерности строения некоторых классов биополимеров, используя возможности априорного отбора “топологически - устойчивых” структур. В первую очередь, такой подход актуален для систематизации структур основных элементов белковых конструкций, которая остается предметом дискуссии и, фактически, только начинает формализовываться.

Таблица 7.1. Экспериментальные [219] и теоретические (рассмотренные в настоящей работе - жирный шрифт, и в [291] - подчеркнуто) параметры спиралей полипептидных цепей

Тип спирали	Остатков на виток	Условная ось по (7.8)	Шаг спирали $H (\text{\AA})$	Радиус спирали $R (\text{\AA})$	Шаговый угол θ по (7.4) ($^{\circ}$)	Шаговый угол $\theta_{\text{эксп.}}$ ($^{\circ}$)	Шаговый угол θ по [291] ($^{\circ}$)
β -структура	2.3	$30/13=2,(307692)$	7.59	1.0			
3_{10} -спираль	3	$30/10=3,(0)$	6	1.9		26.6	
Спираль коллагена	3.3	$40/12=10/3=3,(3)$	9.67	1,6			
α-спираль	3.6	$40/11=3,(63)=40 \exp(-5.5/2.3)$	5.4	2.3	20.9	20.5	<u>18.1</u>
π -спираль	4.3	$30/7=4,(285714)$	4.73	2.8		15.0	

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы по главе 7:

1. Для спиральных биологических структур условия сборки атомов (молекул) в соответствии с топологическими свойствами трехмерного евклидового пространства E^3 могут определяться триангулированной поверхностью U , которая соответствует точке бифуркации катеноида и (задаваемой глобальным представлением Вейерштрасса) минимальной поверхностью M_0 , обладающей нулевым индексом неустойчивости. От M_0 можно перейти к топологически устойчивой спирали с соотношением шага спирали к радиусу, равным $2\pi/\tau^2$, и осью m/p , где m и p – целые, $p = \exp(2\pi/\tau^2)$, m/p - периодическая десятичная дробь.

2. Триангулированная поверхность U определяет прямоугольник, в котором 40 объединений десяти равнобедренных (близких к правильным, т.к. угол при вершине равен 56.4°) треугольников равномерно распределены по 11 виткам. Каждое из таких объединений представляет собой развертку линейного тетраблока, в котором среднее отклонение ребер от

ребер правильного тетраэдра составляет ~2%. Склейка каждой развертки в тетраблок определяет спираль из 40 тетраблоков, объединяемых по грани, с винтовой осью $40/11=3$.(63) и соотношением шага спирали к радиусу, равным $2\pi/\tau^2$. Данная спираль из тетраблоков топологически совпадает со спиралью из 15 линейных тетраблоков, обвивающей в политопе $\{3,3,5\}$ замкнутую в тор тетраэдрическую спираль Бердийка-Коксетера.

3. Спираль, генерируемая тетраблоком, определяет параметры идеальной математической α_0 -спирали при сопоставлении атому C_α (реальной α -спирали) общей вершины тетраэдров, составляющих линейный тетраблок. Параметры α_0 -спирали и экспериментальные параметры α -спирали, соответственно: (a) Отношение шага спирали к радиусу 2.4 и 2.35, шаговый угол 20.9° и 20.5° , расстояние $C_\alpha - C_\alpha$ 3.81 Å и 3.80 Å; (б) Ось 40/11 (вращение на 99°) и 36/10 (вращение на 100°); (в) радиусы 2.3 Å и 2.3 Å.

Соотношение $i \rightarrow i+4$, определяющее (в полиэдральном представлении) расположение водородных связей в α -спирали - это реализация локального соотношения $(40/11)^4 = 10$. Экспериментально наблюдаемая средняя длина α -спирали из 11 остатков определяется локальным соотношением $(40/11)^{10} = 4_1$, задающим разбиение 40 вершин на четыре 11-вершинных цикла, пересекающихся по одной общим вершинам.

4. Генерируемая линейным тетраблоком α_0 – спираль, генерируется также и плоским тетраблоком. Это позволяет установить соответствие положений атомов N, C_α , C', O, H в пептидной плоскости α -спирали с особыми по симметрии точками в экваториальном (пентагональном) сечении плоского тетраблока.

5. Теоретическая винтовая ось 40/11 (т.е. 3.63(63) ост/виток) является эталонной для возможных осей α -спиралей, входящих в суперспираль (спирали из α -спиралей). “Тетраблочную спираль” сискажениями ребер ~2% можно рассматривать как приближение идеального высокосимметричного образца α -спирали с осью 40/11.

6. Оптимальное покрытие сферы парами кругов максимального углового радиуса определяет возможную упаковку одинаково длинных α -спиралей в глобулярном α -белке, который аппроксимируется сферой.

7. Решётка E_8 определяет множество из 35 осей, в которое входят оси $10/3 = 3$, (3) ; $30/13 = 2$, (307692) , $30/7 = 4$, (285714) , соответствующие (с точностью до 2%) числу остатков на виток: в спирали коллагена, в скрученной β -структуре, в π -спирали - базовых спиральных биологических структурах.

Материалы настоящей главы опубликованы в работах [76–78, 84, 100, 111, 127, 133].

Выводы

1. Строение упорядоченной (кристаллической или некристаллической) конденсированной фазы может трактоваться как структурная реализация некоторой математической (симметрийной) конструкции. Некристаллографические симметрии структур, допускающих аппроксимацию цепями одинаковых правильных тетраэдров в 3-мерном Евклидовом пространстве E^3 , могут быть определены отображением в E^3 высокосимметричных n -мерных, $n > 3$, конструкций, которые задают “идеальные прототипы” для реальных структур в E^3 . Универсальной базовой симметрийной структурной единицей цепей правильных тетраэдров в E^3 является тетраблок – 7-вершинное линейное объединение по граням четырех правильных тетраэдров, которое реализуется в линейном (правом и левом) и плоском вариантах. Группа симметрии линейного тетраблока изоморфна проективной специальной линейной группе $PSL(2,7)$ порядка 168, которая является группой автоморфизмов минимальной конечной проективной плоскости $PG(2,2)$, определяемой минимальным полем Галуа (состоящем из 0 и 1) и комбинаторной конструкцией блокового дизайна (системой Штейнера $S(2,3,7)$). Симметрия тетраблока определяется переходом от комбинаторной к “традиционной” геометрии, поэтому только 2 из 168 элементов группы симметрии линейного тетраблока реализуются как кристаллографическая ось 2 порядка. Группа симметрии плоского (неэнантиоморфного) тетраблока изоморфна проективной общей линейной группе $PGL(2,7)$, в которой $PSL(2,7)$ – подгруппа 2-го порядка.

2. Тетраблок вкладывается в 4-мерный многогранник из 600 правильных тетраэдров (политоп $\{3,3,5\}$ с группой симметрии порядка $2^6 \cdot 3^2 \cdot 5^2$), но для определения симметрии цепи из непересекающихся тетраблоков необходимо использовать симметрии 8-мерной решетки векторов E_8 , группа автоморфизмов которой (порядка $2^{14} \cdot 3^5 \cdot 5^2 \cdot 7$) содержит и группу симметрии политопа $\{3,3,5\}$, и группу $PSL(2,7)$. Симметрии решетки E_8 определяют ограниченный набор винтовых осей, в том числе оси 30/11 и 40/11 (с вращением на 132^0 и 99^0), которые характеризуют спирали, образующиеся при единообразном объединении в E^3 линейных тетраблоков одинаковой хиральности по торцевым граням. Один из вариантов объединения тетраблоков (соответствующий оси 30/11) приводит к плотнейшей линейной упаковке правильных тетраэдров - спирали Бердийка-Коксетера, реализующейся в плотноупакованных интерметаллидах и сплавах. Другой вариант объединения тетраблоков (соответствующий оси 40/11) приводит к спирали с отношением шага к радиусу, равным $2\pi/\tau^2$ (где τ – “золотое сечение”, $\tau = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618$). Данная спираль является идеальным

прототипом полипептидной цепи (α -спиралы), который определяет ее структурные параметры с точностью до 2%.

3. Подсистемы корневых векторов решетки H_4 , соответствующей вершинам политопа $\{3,3,5\}$, позволяют задать объединения тетраэдров и элементарно-подобных им триангулированных полиэдров, графы которых определяются конструкциями проективной (комбинаторной) геометрии. Количество вершин в таких кластерах, являющихся независимыми порождающими кластерами тетраэдрических структур (ПКТ), не превышает 10. Этим условиям удовлетворяют 37 ПКТ; они образуют “систему ПКТ”, которая содержит все полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала. Линейный и плоский тетраблоки являются двумя ПКТ в этой системе ПКТ. Из определенных наборов ПКТ собираются упорядоченные плотноупакованные тетраэдрические (металлические) структуры; в частности, плотнейшая кубическая упаковка (ГЦК-решетка) является объединением не имеющих общих вершин спиралей из 7-вершинных ПКТ - одношапочных октаэдров. Фазовые переходы между структурами, которые собираются из ПКТ, определяются взаимными трансформациями этих ПКТ перебросками диагоналей в “ромбах”, образованных парами соседних треугольных граней ПКТ.

4. Система ПКТ позволяет определить порождающий кластер тетракоординированной структуры (ПК) как невыпуклый составной полиэдр, вершины которого принадлежат двум ПКТ (условно, “белому” и “черному”) из этой системы, а бихроматический граф, образованный объединением ближайших друг к другу вершин этих ПКТ, вкладывается в граф инцидентности конечной проективной плоскости $PG(2,q)$, $q = 2, 3, 4$ или отвечает иной конструкции комбинаторной геометрии. Геометрически бихроматический граф ПК должен вкладываться в граф политопа $\{240\}$ – алмазоподобного объединения двух политопов $\{3,3,5\}$. Система ПК строится как квадрат Кэли для всех ПКТ из системы ПКТ: каждый ПКТ определяется как объединение ПКТ строки и ПКТ столбца. Если в ПК отсутствуют “висячие” вершины (т.е. ПК состоит только из циклов), то он является порождающим кластером алмазоподобной структуры (ПКА); в частности, невыпуклый параллелоэдр кристалла алмаза является объединением двух 7-вершинных ПКТ, а его бихроматический граф вкладывается в граф инцидентности конечной проективной плоскости $PG(2,2)$. Количество вершин в ПКА может меняться от 8 до 20; при этом 20-вершинные ПКА могут быть трансформированы в додекаэдр. Ограничение в ПКА 20-ю вершинами дает возможность выделить алмазоподобные структуры из всего класса тетракоординированных структур, содержащего и неалмазоподобные клатраты, фуллериты. Если в графе ПК циклы

отсутствуют, то такой ПК является порождающим кластером тетракоординированной (углеводородно-подобной) цепи (ПКУ).

5. Отображения в E^3 линейных подструктур полигонов $\{240\}$ определяют стержни из ПКА или спирали из ПКУ. Отображение стержня из ПКА на плоскость дает “декорированные полигоны”: треугольник, ромб или трапецию (которые вкладываются в правильный шестиугольник), вершины которых можно разделить на 2 типа. Объединению стержней из ПКА в упорядоченную алмазоподобную структуру соответствуетстыковка таких декорированных полигонов;стыковка приводит к регулярному разбиению плоскости на декорированные треугольники. Это разбиение отображается на себя одной из групп цветной симметрии, изоморфной группе $P6mm$ плоской гексагональной решетки. Все идеальные прототипы упорядоченных некристаллических алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, других линейных дефектов в алмазе, алмазоподобных пленок) могут быть получены определением всех групп цветной симметрии, отображающих симметрию разбиения плоскости на декорированные полигоны. Отображения второй координационной сферы решетки E_8 на многогранник (грани которого разбиты на те же декорированные полигоны) приводят к построению в E^3 суперспирали из стержней, генерируемых ПКА, с боковыми гексациклами и поперечными пента-, гекса- и гептациклами. Объединение ПКУ в E^3 дает идеальные прототипы углеводородно-подобных цепей различных типов.

6. Строение тетракоординированных, но не алмазоподобных, структур газогидратов может быть сведено к трехуровневой схеме: полиэдр-полость, стержень из полиэдр-полостей, объединение стержней. Симметрии конфигурации 12_3 конечной проективной геометрии позволяют *a priori* определять графы всех 10 простых 24-вершинных 14-гранных стереоэдров (полиэдр-полостей) кристаллических газогидратов. Предложенная модель фазовых превращений в структурах газогидратов, основанная на симметрийно допустимых взаимных трансформациях простых 24-вершинных 14-гранных полиэдров, является реалистичной: она позволяет описать выход молекул газа из полиэдр-полостей и, в частности, фазовое превращение газогидрат I – гексагональный (обычный) лед. Такое превращение можно рассматривать как двухэтапный процесс:

- (i) трансформации стержней из тетракадекаэдров в стержни из усеченных октаэдров;
- (ii) трансформации стержней из усеченных октаэдров в стержни льда.

Литература

1. Friedrichs O. D., Dress A.W. M., Huson D. H., Klinowski J., Mackay A. L. Systematic enumeration of crystalline networks // Nature. 1999. V. 400. P. 644-647.
2. Изюмов Ю.А. Сыромятников В. Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука. 1984. 245 с.
3. Danzer L., Papadopolos Z., Talis A. Full equivalence between Socolar's tilings and the (A, B, C, K)-tillings leading to a rather natural decoration // International Journal of Modern Physics. B. 1993. V. 7. №6-7. P.1379-1386.
4. Ле Ты Куок Тханг, Пиунихин С. А., Садов В. А. Геометрия квазикристаллов // Успехи математических наук. 1993. Т. 48, №1. С. 41-102.
5. Mosseri R., Sadoc J. F. Order and disorder in amorphous, tetrahedrally coordinated semiconductors. A curved-space description // Philosophical Magazine. B. 1982. V. 45. №5. P. 467-483.
6. Mosseri R., DiVincenzo D.P., Sadoc J.F., Brodsky M.H. Polytope model and the electronic and structural properties of amorphous semiconductors // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. 1985. V.32. No.6. P.3974-4000.
7. Sadoc J. F., Rivier N. Hierarchy and disorder in non-crystalline structures // Philosophical Magazine. B. 1987. V. 55. №5. P. 537-573.
8. Sadoc J. F., Mosseri R. Icosahedral order, curved space and quasicrystals // In: Aperiodicity and order, V.3. Extended Icosahedral Structures. M.V. Jarić, D. Gratias, eds. Boston etc: Academic press, 1989. P.163-188.
9. Nelson D. R. Order, frustration, and defects in liquids and glasses // Physical Review. B. 1983. V. 28. №10. P. 5515-5535.
10. Rivier N., Duffy D.M. On the topological entropy of atomic liquids and the latent heat of fusion // Journal of Physics. C: Solid State Phys. 1982. V. 15. P.2867-2874.
11. Mosseri R., Sadoc J. P. Polytopes and projection method: an approach to complex structures // Journal de Physique, C-3. 1986. V. 47. P. 281-297.
12. Kleman M. Curved crystals, defects and disorder // Advances in Physics, 1989. V.38. №6. P. 605-667.
13. Галиулин Р. В. Высшая кристаллография алмаза // Материаловедение. 1999. №6. С. 2-5.
14. Руднев С. В. Групповой подход к решеткам в эллиптическом пространстве // В кн.: ICS моделирование роста и деформации кристаллов минералов. Томск: Изд-во Томского университета, 1994. 210 с.

15. Дубровин Б. А., Новиков С.П., Фоменко А. Т. Современная геометрия: Методы и приложения. Т.1. Геометрия поверхностей, групп преобразований и полей. М.: Изд-во Эдиториал УРСС. 1998. 336 с.; Т.2. Геометрия и топология многообразий. М.: Изд-во Эдиториал УРСС. 1998. 277 с.; Т.3. Теория гомологий. М.: Изд-во Эдиториал УРСС. 2001. 288 с.
16. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1. 415 с.
17. Домрачев Г. А., Лазарев А. И. Роль чисел в моделях апериодических структур // XVI научные чтения им. академика Н. В. Белова, 1997. С. 79-81.
18. Курош А. Г. Теория групп. М.: Наука. 1967. 648 с.
19. Hahn T., ed. *International Tables for Crystallography*, Vol. A: *Space-Group Symmetry*. 5th edition, Dordrecht: Springer. 2005. 911 p.
20. Ефимов Н. В. Высшая геометрия. М.: Наука. 1978. 576 с.
21. Картиеси Ф. Введение в конечные геометрии. М.: Наука. 1980. 320 с.
22. Коксетер Г. С. М., Мозер У. О. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. М: Наука. 1980. 240с.
23. Коксетер Г. С. М. Введение в геометрию. М.: Наука. 1966. 648 с.
24. Coxeter H. S. M. Regular Polytopes. N.Y.: Dover, 1973. 321 p.
25. Manton N. S. Connections on discrete fibre bundles // Communications in Mathematical Physics. 1987. V. 113. P. 341-351.
26. Sadoc J. F., Mosseri R. The E8 Lattice and quasicrystals // Journal of Non-Crystalline Solids. 1993. V. 153-154. P. 247-252.
27. Щербак О. П. Волновые фронты и группы отражений // Успехи математических наук. 1988. Т.43. №3. С. 125-160.
28. Moody R. V., Patera J. Chen L. Non-crystallographic root systems. Fields institute monographs. 1998. V. 10. P. 135-178.
29. Рингель Г. Теорема о раскраске карт. М.: Мир. 1977. 256 с.
30. Хамфри Дж. Линейные алгебраические группы. М.: Наука, 1980, 400 с.
31. Биркгоф Г. Теория решеток. М.: Наука. 1984. 564 с.
32. Фоменко А. Т. Дифференциальная геометрия и топология. Дополнительные главы. Ижевск: Ижевская республиканская типография. 1999. 252 с.
33. Талис А. Л. Симметрия тетракоординированных и тетраэдрических структур в рамках алгебраической геометрии // В кн.: А.В. Шубников, В.А. Копчик. Симметрия в науке и искусстве. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2004. С.419-488.

34. Крапошин В. С., Талис А. Л. Симметрийно-структурные закономерности сопряжения различных упорядоченных структур в единный комплекс // в кн.: Комплексные неметаллические включения и свойства стали. (Зайцев А.И., Крапошин В.С., Родионова И.Г., Семернин Г.В., Талис А.Л.), М.: Металлургиздат. 2015. 276 с. Глава 3 (С. 101-180).
35. Талис А. Л. Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур // В кн.: Синтез минералов. Александров: ВНИИСИМС. 2000. Т. 3. С. 321-415.
36. Самойлович М. И., Талис А. Л. Основы теории симметрии наноструктурных состояний. // В кн.: Самойлович М.И., Талис А.Л., Белянин А.Ф. Наноматериалы I. Основы теории симметрии наноструктурных состояний. II. Тонкие пленки алмазоподобных материалов как наноструктурированные системы. М.: ЦНИТИ “Техномаш”. 2006. 400 с. Глава I (C.5-239).
37. Samoylovich M. I., Talis A. L. A Foundation for the theory of symmetry of ordered nanostructures. Moscow: Central Research Technological Institute “Technomash”. 2007. 198 p.
38. Крапошин В. С., Талис А. Л. Некристаллографические симметрии кристаллической структуры цементита и ее превращений // В кн.: “Цементит в углеродистых сталях”, коллективная монография под ред. В.М. Счастливцева. Екатеринбург: ООО “Издательство УМЦ УПИ”. 2017. 286 с. Глава 2 (С. 42-79).
39. Самойлович М. И., Талис А. Л., Миронов М. И. Квазикристаллы с бесконечной точечной группой, как симметрийная основа некристаллических алмазоподобных материалов // Неорганические материалы. 2002. Т. 38, № 4. С. 443 - 448.
40. Danzer L., Papadopolos Z., Talis A. Full equivalence between Socolar’s tilings and the (A, B, C, K)-tilings leading to a rather natural decoration // International Journal of Modern Physics B. 1993. V. 7. №6-7. P. 1379-1386.
41. Крапошин В. С., Талис А. Л., Панкова М. Н. Политопный топологический подход к описанию мартенситного превращения // Металловедение и термическая обработка металлов. 1999. №8. С.23-28.
42. Талис А. Л. Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур. I. Конечные проективные плоскости и определяемые ими особые кластеры алмазоподобных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. №. 4. С.583–593.
43. Талис А. Л. Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур. II. Алмазная упаковка в пространстве трехмерной сферы, подконфигурации конечных проективных плоскостей и порождающие кластеры алмазоподобных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 5. С.775–784.
44. Талис А. Л. Кластеры алмазоподобных структур как евклидовы реализации конструкций проективной геометрии // Доклады Академии наук. 2002. Т. 382. № 1. С. 20-23.

45. Krashin V. S., Talis A. L., Dubois J. M. Structural realization of the polytope approach for the geometrical description of the transition of a quasicrystal into a crystalline phase // Journal of Physics, Condensed Matter. 2002. V. 14. No.39. P. 8987-8996.
46. Krashin V. S., Pankova M. N., Talis A. L., Freiman Yu. A. An application of a polytope (4D-polyhedron) concept for the description of polymorphic transitions: Iron martensite and solid oxygen // Journal De Physique IV (Proceedings). 2003. V. 112. P. 119-122.
47. Талис А. Л. Закономерности строения газогидратов и конструкции, определяемые 8-мерной решеткой E_8 // Доклады Академии наук. 2003. Т. 390. №2. С. 172-177.
48. Самойлович М. И., Талис А. Л., Миронов М. И. Квазикристаллы с бесконечной точечной группой, как симметрийная основа алмазоподобных структур // Доклады Академии наук. 2002. Т. 384, № 6. С. 760-763.
49. Талис А. Л. Структурные закономерности строения газогидратов в рамках обобщенной кристаллографии // Кристаллография. 2003. Т. 48, № 3. С. 391-394.
50. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е. Наноструктуры с когерентными границами и локальный подход // Физика и химия стекла. 2004. Т. 30, № 6. С.732-749.
51. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е., Шудегов В.Е. Геометрические структурные комплексы наночастиц ZrO_2 // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. №2. С. 252-269.
52. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е. О строении гигантского кластера палладия Pd_{561} // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. №2. С. 350-355.
53. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е. О строении икосаэдрических кеплератов и их производных // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. №3. С. 538-543.
54. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е. Теория строения когерентных границ в наночастицах ZrO_2 // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. №4. С. 545-562.
55. Шевченко В. Я., Самойлович М. И., Талис А. Л., Мадисон А. Е. Строение икосаэдрических наноразмерных объектов // Физика и химия стекла. 2005. Т. 31. № 6. С. 1133-1141.
56. Krashin V. S., Talis A. L., Wang Y. J. Description of Polymorphic Transformations of Ti and Zr in the Framework of the Algebraic Geometry // Materials Science and Engineering: A. Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, 2006. Vols. 438-440. P. 85-89.

57. Крапошин В. С., Талис А. Л. Возможности обобщенной кристаллографии. Описание полиморфных превращений и новых дефектов в структуре алмаза // Известия ВУЗов, Материалы электронной техники. 2006. № 2. С. 45-53.
58. Kravoshin V. S., Talis A. L., Samoylovitch M. I. Axial (helical) substructures determined by the root lattice E_8 as generating clusters of the condensed phases // Journal of Non-Crystalline Solids. 2007. V. 353. Nos. 32-40. P. 3279-3284.
59. Крапошин В. С., Талис А. Л., Нгуен Ван Тхуан, Беляев О. А. Кристаллическое строение промежуточных структур в сплавах с эффектом запоминания формы как реализация конструкций алгебраической геометрии // Металловедение и термическая обработка металлов. 2007. №7. С.3-9.
60. Самойлович М. И., Талис А. Л. Особый класс геликоидов с кристаллографическими, квазикристаллографическими и нецелочисленными осями // Доклады Академии наук. 2007. Т. 414. № 1. С. 30-35.
61. Samoylovich M., Talis A. Steiner systems (t - (v, k, λ) schemes) and special features of the nanostructures symmetry description // Journal of the European Ceramic Society. 2007. V. 27. Nos. 2-3. P. 993-999.
62. Талис А. Л., Беляев О. А., Ронова И. А., Рей А. А., Терещенко Г. Ф. Газогидраты и тетракоординированные структуры, определяемые конструкциями алгебраической геометрии // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 2. С. 199-203.
63. Самойлович М. И., Талис А. Л. Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решетка E_8 и определяемые ею кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 602-609.
64. Крапошин В. С., Талис А. Л., Ван Тхуан Нгуен. Структура w-фазы как конструкция проективной геометрии и промежуточная конфигурация при полиморфных превращениях в титане и цирконии // Материаловедение. 2007. №8. С. 2-9.
65. Самойлович М. И., Талис А. Л. Алгебраические политопы и симметрийные закономерности строения упорядоченных структур // Доклады Академии наук. 2008. Т.420. № 4. С. 472-477.
66. Kravoshin V. S., Talis A. L., Kosushkin V. G., Ogneva A. A., Zinover L. I. Structures of the cubic and rhombohedral high-pressure modifications of silicon as packing of the rod-like substructures determined by the algebraic geometry // Acta Crystallographica Section B: Structural Science. 2008. V. 64. No.1. P. 26-33.

67. Krushin V. S., Talis A. L., Lam H. T. The structure model of a cubic aperiodic phase ('quasicrystal without forbidden symmetry axes') // Journal of Physics, Condensed Matter. 2008. V. 20. No. 11. Art.114115.
68. Krushin V. S., Talis A. L., Lam Ha Thanh, Dubois J.-M. Model for the transformation of an icosahedral phase into a B2 crystalline phase // Journal of Physics: Condensed Matter. 2008. V. 20. No. 23. Art. 235215.
69. Самойлович М. И., Талис А. Л. Инварианты кристаллографической системы E_8 , алгебраические политопы и трехмерные упорядоченные структуры // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 2. С. 199-202.
70. Талис А. Л., Беляев О. А., Pey A. A., Талис Р. А. К вопросу о симметрийной классификации упорядоченных тетракоординированных структур // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 3. С. 391-396.
71. Samoylovich M. I., Talis A. L. Symmetrical features and local phase transitions of ordered solid structures: Tetravalent structures of gas hydrates // Crystallography Reports. 2009. V. 54. №7. P. 1101-1106.
72. Samoylovich M. I., Talis A. L. Gosset helicoids: II. Second coordination sphere of eight-dimensional lattice E_8 and ordered noncrystalline tetravalent structures // Crystallography Reports. 2009. V. 54. №7. P. 1117-1127.
73. Самойлович М. И., Талис А. Л., Терещенко Г. Ф. Трансформации стержней Госсета как структурная основа фазовых превращений газогидрат – лед // Доклады Академии наук. 2009. Т. 425. №4. С. 471-476.
74. Samoylovich M. I., Talis A. L. A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates // Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography. 2010. V. 66, Part 5. P. 616-625.
75. Krushin V., Jakovleva I., Karkina L., Nuzhny G., Zubkova T., Talis A. Microtwinning as a common mechanism for the martensitic and pearlitic transformations // Journal of Alloys and Compounds. 2013. V. 577, Supplement 1. P. s30-s36.
76. Самойлович М. И., Талис А. Л. Структурные закономерности геликоидальнонаподобных биополимеров в рамках алгебраической топологии. I. особый класс устойчивых линейных структур, определяемых последовательностью алгебраических политопов // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 521-529.
77. Самойлович М. И., Талис А. Л. Структурные закономерности геликоидально-подобных биополимеров в рамках алгебраической топологии. II. альфа-спираль и ДНК // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 5. С. 639-651.

78. Samoylovich M. I., Talis A. L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 2014. V. 70, Part 2. P. 186-198.
79. Talis A. L., Kravoshin V. S. Finite noncrystallographic groups, 11-vertex equi-edged triangulated clusters and polymorphic transformations in metals // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 2014. V. 70, Part 6. P. 616-625.
80. Крапошин В. С., Талис А. Л., Демина Е. Д., Зайцев А. И. Кристаллогеометрический механизм срастания шпинели и сульфида марганца в комплексное неметаллическое включение // Металловедение и термическая обработка металлов. 2015. № 7. С.4-12.
81. Kondrat'ev S. Yu, Kravoshin V. S., Anastasiadi G. P., Talis A. L. Experimental observation and crystallographic description of M_7C_3 carbide transformation in Fe–Cr–Ni–C HP type alloy // Acta Materialia. 2015. No.100. P.275-281.
82. Kravoshin V. S., Schastlivtsev V. M., Jakovleva I. L., Talis A. L. New model for carbon distribution in austenite and steel transformation products // Materials Today: Proceedings. 2015. V.2. Supplement 3. P. S557-S560.
83. Каблов Д. Е., Крапошин В. С., Талис А. Л. Кристаллографический механизм локального разворота решетки при росте монокристаллов жаропрочных никелевых сплавов // Металловедение и термическая обработка металлов. 2016. № 12. С. 18 - 23.
84. Samoylovich M. I., Talis A. L. Symmetrical-geometry constructions defining helicoidal biostructures. The case of alpha- helix // ArXiv: 1606.01237 [physics.bio-ph].
85. Крапошин В. С., Талис А. Л. Симметрийные основы полимерной модели плотноупакованных металлических жидкостей и стекол // Расплавы. 2016. № 2. С.85-98.
86. Talis A. L., Kravoshin V. S., Kondrat'ev S. Y., Nikolaichik V. I., Svyatysheva E. V., Everstov A. A. Non-crystallographic symmetry of liquid metal, flat crystallographic faults and polymorph transformation of the M_7C_3 carbide // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 2017. V. 73, Part 3. P. 209–217.
87. Крапошин В. С., Кондратьев С. Ю., Талис А. Л., Анастасиади Г. П. Экспериментальное исследование *in situ* превращения карбида M_7C_3 в литом сплаве Fe-Cr-Ni // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 3. С. 240-246.
88. Крапошин В. С., Кондратьев С. Ю., Талис А. Л., Анастасиади Г. П. Кристаллография *in situ* превращения карбида M_7C_3 в литом сплаве Fe-Cr-Ni // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 3. С. 247-254.
89. Danzer L., Talis A. L. A new decoration of the Socolar-Steinhart tilings; an initial model for quasicrystals // In: Symposia Gaussiana Conf. A. Berlin - New York, 1995. P. 377-387.

90. Талис А. Л. Построение обобщенной кристаллографии алмазоподобных структур на основе алгебраической геометрии // Труды IV Международной конференции “Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение”. Александров: ВНИИСИМС, 1999. С. 219-275.
91. Самойлович М. И., Талис А. Л., Рей А. А., Петровский В. А. Закономерности строения алмазоподобных структур, определяемые 8-мерной решеткой E8 // В сб.: Углерод: минералогия, геохимия, космохимия. Сыктывкар: Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, 2003. С. 62-67.
92. Самойлович М. И., Белянин А. Ф., Петухов К. Ю., Талис А. Л., Рей А. А., Каменева А. Л. Структурные особенности алмазоподобных материалов. Нанокластеры в рамках аппарата алгебраической геометрии // В сб.: Алмазные пленки и пленки родственных материалов. Харьковская научная ассамблея, 2003. С. 116-132.
93. Самойлович М. И., Талис А. Л. Топологические особенности конструкции алмазоподобного квазикристалла с бесконечной точечной группой // В сб.: Алмазные пленки и пленки родственных материалов. Харьковская научная ассамблея, 2003. С. 133-146.
94. Самойлович М. И., Талис А. Л. Структурные фазовые переходы в наносистемах // В сб.: Оборудование и технологии термической обработки металлов и сплавов. Часть II. Харьков: Изд. ННЦ Украины “Харьковский физико-технический институт”. 2005. С. 34-44.
95. Самойлович М. И., Талис А. Л. Собираемые из геликоидовnanoструктуры и конструкции алгебраической // В сб.: Фуллерены и фуллереноподобные структуры в конденсированных средах. Минск: Институт тепло- и массообмена им. А.В.Лыкова НАН Беларуси. 2006. С. 48-55.
96. Самойлович М. И., Талис А. Л. Фазовые переходы в наносистемах // В сб.: Оборудование и технологии термической обработки металлов и сплавов. Харьков: ХФТИ НАН Украины. 2006. С. 223-233.
97. Самойлович М. И., Талис А. Л. Фазовые переходы в наносистемах и геликоидальные подструктуры // Фундаментальные основы инженерных наук. Сборник трудов Международной научной конференции, посвященной 90-летию со дня рождения Нобелевского лауреата академика А.М. Прохорова. Москва, 2006. Т. 2. С. 48-54.
98. Талис А. Л. Симметрийные закономерности строения упорядоченных тетракоординированных структур // В сб.: Исследование углерода - успехи и проблемы. М.: Наука. 2007. С. 189-205.
99. Талис А. Л. Кластерная сборка 3-мерных упорядоченных тетраэдрических (тетракоординированных) структур и 2-мерная проекция 8-мерной системы векторов E8 //

Сборник Трудов VIII Всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2012. С. 44-55.

100. Талис А. Л. Некристаллографическая симметрия биополимеров. Закономерности упаковки альфа-спиралей в глобулярном белке // Труды IX Всероссийской Ферсмановской научной сессии. Апатиты, 2-3 апреля 2012 г. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2012. С.307-312.

101. Самойлович М. И., Талис А. Л. Симметрийные закономерности строения геликоидально - подобных биополимеров (альфа - спирали и ДНК–структуры) в рамках алгебраической топологии // Материалы XVIII международной конференции “Высокие технологии в промышленности России”. М.: ЦНИТИ “Техномаш”, 2012. С. 394-424.

102. Талис А. Л. Конструкции алгебраической геометрии, спиральные подструктуры политопов и структура α -спиралей // Сборник Трудов IX Всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2013. С. 84-93.

103. Талис А. Л. Спираль с двумя углами вращения и другие некристаллографические симметрии (био)полимеров // Сборник Трудов IX Всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2013. С. 93-100.

104. Талис А. Л., Крапошин В. С. Симметрийные основы образования кристаллических сростков в металлургических расплавах // Труды XI всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2014. С. 134-146.

105. Самойлович М. И., Талис А. Л. Симметрийные основы структурной организации спиральных биосистем: альфа - спираль и ДНК-структуры // Материалы XIX Международной конференции “Высокие технологии в промышленности России”. М.: ЦНИТИ “Техномаш”, 2014. С. 135-154.

106. Талис А. Л. Топологически устойчивая минимальная поверхность, политопы с симметрией группы Коксетера F4 и модели биополимеров // Труды XI всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2014. С. 121-134.

107. Талис А. Л. От особой серии комбинаторных конструкций к тетраблоку – строительной единице цепей, аппроксимирующих линейные подструктуры биополимеров. // Труды XII Всероссийской школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2015. С. 106-117.

108. Талис А. Л. Закономерности сборки тетраблоков и спиральные подструктуры, аппроксимирующие спирали биополимеров // Труды XII Всероссийской школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2015. С. 118-127.
109. Талис А. Л. Спирали из тетраблоков и закономерности строения альфа-спирали и ДНК // Труды XII Всероссийской школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2015. С. 128-132.
110. Кучанов С. И., Талис А. Л., Степенщиков Д. Г. Комбинаторно – различные подмножества: граней в $(12+f)$ -вершинных объединениях тетраэдров и рёбер в фуллеренах особого класса C_{60+6f} , $f=0,2,3\dots$. Структурные приложения // Труды XIII Всероссийской (с международным участием) научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2016. С. 39-51.
111. Талис А. Л. Симметрийные закономерности сборки альфа-спиралей в глобулярные альфа-белки и суперспирали // Труды XIII Всероссийской (с международным участием) научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2016. С.99-108.
112. Талис А. Л. Спирали из тетраблоков и конструкции алгебраической геометрии, определяющие модели со структурными параметрами спиралей A, B, Z-ДНК и других биополимеров // Труды XIII Всероссийской (с международным участием) научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты: Геологический институт КНЦ РАН, 2016. С.110-114.
113. Самойлович М. И., Талис А. Л. Некристаллографические симметрийные конструкции, определяющие строение спиральных биополимеров // Материалы VIII Международной конференции “Наноинженерия”. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016. С. 252-263.
114. Самойлович М. И., Талис А. Л. Структуры биополимеров и спирали из 7-вершинных тетраблоков, определяемые неевклидовыми и n-мерными алгебраическими конструкциями // Материалы VIII Международной конференции “Наноинженерия”. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016. С. 264-275.
115. Крапошин В. С., Талис А. Л. Теория симметрии наноструктурных состояний конденсированных сред как структурная реализация конструкций алгебраической геометрии // В кн.: “Высокие технологии в промышленности России”, колл. моногр. под ред. М. И. Самойловича, А. Ф. Белянина. М.: ЦНИТИ “Техномаш”, 2004. 415 с. Глава II (С.121-257).
116. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Неклассическая симметрия углеводородных цепей липидов биомембран (теоретические подходы и компьютерное моделирование) // Олигомеры

- 2017. Сборник трудов XII Международной конференции по химии и физикохимии олигомеров. Черноголовка, 16-21 октября 2017 г. Пленарные лекции. Т.1. / [отв. ред. М.П. Березин]. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2017. С.135-161.
117. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Свойства углеводородных цепей липидов природных мембран и некристаллографические симметрийные инварианты в их структуре // Структура и динамика молекулярных систем: Сборник статей. Под ред. А.А. Щербиной. Москва: ИФХЭ РАН. 2018. Вып.XXV. С.125-135.
118. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Базовая структурная единица для описания некристаллографической симметрии олигомерных цепей в молекулах фосфолипидов // Олигомеры - 2019. Сборник трудов XVIII Международной конференции по химии и физикохимии олигомеров. Нижний Новгород, 16-21 сентября 2019 г. Пленарные лекции. Т.1. / [отв. ред. М.П. Березин]. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2019. С.163-182.
119. Rabinovich A. L., Talis A. L. Combinatorial constructions and non-crystallographic symmetry of tetrahedral and tetra-coordinate structures // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. № 1. С.53-54.
120. Talis A. L., Rabinovich A. L. Hyperbolic cells, symmetry of the Klein quartic and the hidden (non-crystallographic) symmetry of components of natural phospholipids // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. вып.1. С. 56-58.
121. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Универсальность тетраблока как основа общего подхода к отображению некристаллографической симметрии углеводородных цепей // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. вып.2. с.186-187.
122. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Базовая единица структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, и ее теоретико-групповое обоснование // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. вып.2. с.191-192.
123. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Алгебраическая геометрия и структурная основа барьерной функции биомембранны // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. вып.3. с.275-276.
124. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Тетраблок и тетраэдрические цепи с “некристаллографической” симметрией. // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2018. Т.25. вып.3. с.280-282.
125. Семенов М. Ю., Крапошин В. С., Талис А. Л., Жиляков А. Ю., Королев И. П. Расчет энергетического порога полиморфного превращения в системе Fe - Cr методом атомистического моделирования // Проблемы черной металлургии и материаловедения. 2018. № 3. С.54-63.

126. Крапошин В. С., Талис А. Л., Каменская Н. И., Арестов В., Зайцев А. И. Размещение коллективных атомов B12 в кристаллической структуре γ -Fe и влияние бора на прокаливаемость стали // Металловедение и термическая обработка металлов. 2018. № 2. С.5-13.
127. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров // Кристаллография. 2019. Т.64. № 3. С.341-350.
128. Kravoshin V. S., Simich-Lafitskiy N. D., Talis A. L., Everstov A. A., Semenov M. Yu. Formation of the cementite crystal in austenite by transformation of triangulated polyhedra // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. 2019. V.75. P.325-332.
129. Kravoshin V., Talis A., Simich-Lafitskiy N. The symmetry origin of the austenite-cementite orientation relationships // Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials. 2019. V.234. No. 4. P.237-245.
130. Крапошин В. С., Колобнев Н. И., Рябова Е. Н., Эверстов А. А., Талис А. Л. Неоднородные твердые растворы в сплавах системы Al–Cu–Li: возможное строение кластеров // Металловедение и термическая обработка металлов. 2019. № 2. с.3-12.
131. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Алмазоподобный 4-мерный многогранник {240} как основа описания некристаллографической симметрии линейных тетракоординированных структур: составные тетраблоки // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.1. С.90-92.
132. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Углеводородно-подобные цепи с некристаллографической симметрией и комбинированные тетраблоки // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.1. С.84-86.
133. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Некристаллографическая симметрия тетраблочных спиралей // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.2. С.180-182.
134. Талис А. Л., Рабинович А. Л. Расслоение Хопфа для 4-мерного многогранника {240} и линейные тетракоординированные цепи // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.2. С.182-184.
135. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Отображение некристаллографической симметрии фосфолипидов биологических мембран: семейства ω 3 и ω 6 углеводородных жирнокислотных цепей // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.4. С.000.
136. Рабинович А. Л., Талис А. Л. Полиненасыщенные углеводородные цепи фосфолипидов биомембран с метиленпрерывающимися двойными связями и

некристаллографическая симметрия // Обозрение прикладной и промышленной математики. 2019. Т.26. Вып.4. С.000.

137. Делоне Б. Н., Долбилин Н. П., Штогрин М. И., Галиуллин Р. В. Локальный критерий правильности системы точек // Доклады Академии наук СССР. Серия Математика. 1976. Т. 227. №1. С. 19-21.
138. Галиуллин Р. В. Кристаллографическая геометрия. Отв. ред. Д.К. Фаддеев. Изд. 3-е. М.: Книный дом “Либроком”, 2009. 136 с.
139. Бурбаки Н. Группы и алгебры Ли. М.: Мир, 1972. 344 с.
140. O’Keeffe M., Andersson S. Rod Packings and Crystal Chemistry // Acta Crystallographica. Section A. 1977. V.33. P.914-923.
141. Лорд Э., Маккей А., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 264 с.
142. Baez J. 2013. <http://math.ucr.edu/home/baez/klein.html>
143. Sadoc J.F., Rivier N. Boerdijk-Coxeter helix and biological helix // The European Physical Journal B. 1999. V.12. P.309-318.
144. Lisi A. G. An Exceptionally Simple Theory of Everything // arXiv: 0711.0770v1 [hep-th] 6 Nov 2007.
145. Brown E. The Fabulous (11,5,2) Biplane // Mathematics Magazine. 2004. V.77. No.2. P.87–100.
146. Гилберт Д. Ю., Кон-Фоссен С. Наглядная геометрия. М.: Наука, 1981. С.289.
147. Coxeter H. S. M. Self-dual configurations and regular graphs // Bulletin of the American Mathematical Society. 1950. V.56. P.413-455.
148. Lijnen E., Ceulemans A., Fowler P.W., Deza M. The undecakisicosahedral group and a 3-regular carbon network of genus 26 // Journal of Mathematical Chemistry. 2007. V.42. No.3. P. 617-644.
149. Mackay A. L. Generalized crystallography // Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. 1995. V.336. P.293-303.
150. Schwarzenbach D. *Crystallography*. Chichester etc.: John Wiley & Sons. 1996. 241 p.
151. Винберг Э. Б., Шварцман О. В., Дискретные группы движений пространств постоянной кривизны // В кн.: Итоги науки и техники. Серия Современные проблемы математики. Фундаментальные направления, 1988. Т. 29. С.147–259. Глава 3. Кристаллографические группы, С.182-192.
152. Akivis M. A., Goldberg V. V. Conformal Differential Geometry and its Generalizations. 1996. N.Y. etc.: Wiley-Intersc. Publ. 383 p.

153. Kramer P., Neri R. On Periodic and Non-periodic Space Fillings of Em Obtained by Projection // *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*. 1984. V.40. P.580-587.
154. Вайнштейн Б. К. Современная кристаллография. Т.1. Симметрия кристаллов. Методы структурном кристаллографии. М.: Наука. 1979. 384 с.
155. Frobenius F. G., Über die unzerlegbaren diskreten Bewegungsgruppen, *Sitzungsberichte der Konigl. Preuss. Akad. Wiss. Berlin*. 1911. S.654–655; *Gesammelte Abh.* V. 3. P.507–518. Berlin: Springer-Verlag. 1968.
156. Zassenhaus H. Über einen Algorithmus zur Bestimmung der Raumgruppen // *Commentarii Mathematici Helvetici*. 1948. Bd. 21. S.117-141.
157. Shmueli U., ed. International Tables for Crystallography, Vol. B: Reciprocal Space. 2nd edition, Dordrecht: Kluwer. 2001. 593 p.
158. Rossmann M. G., Arnold E., eds. International Tables for Crystallography, Vol. F: Crystallography of Biological Macromolecules. Dordrecht: Kluwer. 2001. 807 p.
159. Takayasu H. Fractals in physical sciences. Manchester, N.Y.: Manchester Univ. Press. 1990. 170 p.
160. Argos P., Rossmann M. G. Molecular replacement methods. In Theory and practice of direct methods in crystallography, ed. by Ladd M.F.C., Palmer R.A., N.Y.: Plenum, 1980. P.361–417.
161. Nespolo M., Souvignier B., Litvin D. B. About the concept and definition of “noncrystallographic symmetry” // *Zeitschrift für Kristallographie*. 2008. V.223. No.9. P.605-606.
162. Moreira de Oliveira M. Jr, Eon J.-G. Non-crystallographic nets: characterization and first steps towards a classification // *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*. 2014. V.70. P.217–228.
163. Müller U. Die Symmetrie von Spiralketten (The symmetry of helical chains) // *Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*. 2017. V.73. No.3. P.443-452.
164. Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., Curl R. F., Smalley R. E. C₆₀: Buckminsterfullerene // *Nature*. 1985. V.318. P.162–163.
165. Wang S., Buseck P. R. Packing of C₆₀ molecules and related fullerenes in crystals: a direct view // *Chemical Physics Letters*. 1991. V.182. No.4. P.1-4.
166. Hornfeck W., Kuhn P. Octagonal symmetry in low-discrepancy β-manganese // *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*. 2014. V.70. P.441–447.
167. Nelson D. L., Cox M. M. *Lehninger Principles of Biochemistry*. N.Y.: Freeman W.H. and Co.; 6th edition. 2013.

168. Hartmann M. D., Mendler C. T., Bassler J., Karamichali I., Ridderbusch O., Lupas A. N., Alvarez B. H. α/β coiled coils // eLife. 2016. V.5. Art.e11861.
169. Braun E., Lee Y., Moosavi S. M., Barthel S., Mercado R., Baburin I.A., Proserpio D. M., Smit B. Generating carbon schwarzites via zeolite-templating // Proceedings of the National Academy of Sciences of the U.S.A. 2018. V.115. No.35. P.E8116-E8124.
170. Ceulemans A., King R. B., Bovin S. A., Rogers K. M., Troisi A., Fowler P. W. The heptakisoctahedral group and its relevance to carbon allotropes with negative curvature // Journal of Mathematical Chemistry. 1999. V.26. No.1-3. P.101–123.
171. Boerdijk A. H. Some remarks concerning close-packing of equal spheres // Philips Research Reports 1952. V.7. P.303–313.
172. Kléman M., Sadoc J. F. A tentative description of the crystallography of amorphous solids // Journal de Physique Lettres (Paris). 1979. V.40. No.21. P.L569-L574.
173. Sadoc J. F. Use of regular polytopes for the mathematical description of the order in amorphous structures // Journal of Non-Crystalline Solids. 1981. V.44. No.1. P.1-16.
174. Lord E. A., Ranganathan S. Sphere packing, helices and the polytope {3,3,5} // The European Physical Journal D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics. 2001. V.15. P.335-343.
175. Cartan E. Geometry of Riemannian spaces. Brookline: Math Sci. Press. 1983. 506 p. (Engl. transl. from Cartan É. Leçons sur la Géométrie des Espaces de Riemann. Paris: Gauthier-Villars. 1951).
176. Sadoc J.-F., Charvolin J. Crystal structures built from highly symmetrical units // Journal de Physique I. France. 1992. V.2. No.6. P. 845-859.
177. Ishii Y. Propagating Local Positional Order in Tetrahedrally Bonded Systems // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 1988. V.44. P.987-998.
178. Steurer W., Deloudi S. Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag. 2009. 384 p.
179. Pedersen M. C., Delgado-Friedrichs O., Hyde S. T. Surface embeddings of the Klein and the Möbius-Kantor graphs // Acta Crystallographica. A. 2018. V.74. P.223–232.
180. Hyde S. T., Delgado-Friedrichs O., Ramsden S. J., Robins V. Towards enumeration of crystalline frameworks: the 2D hyperbolic approach // Solid State Sciences. 2006. V.8. No.7. P.740–752.
181. Ramsden S. J., Robins V., Hyde S. T. Three-dimensional Euclidean nets from two-dimensional hyperbolic tilings: kaleidoscopic examples. // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. 2009. V.65. P.81–108.

182. Castle T., Evans M. E., Hyde S. T., Ramsden S., Robins V. Trading spaces: building three-dimensional nets from two-dimensional tilings // Interface Focus. 2012. V.2. No.5. P.555-566.
183. Delgado-Friedrichs O., Hyde S. T., O'Keeffe M., Yaghi O. M. Crystal structures as periodic graphs: the topological genome and graph databases // Structural Chemistry. 2017. V.28. P.39–44.
184. Kostant B. The Graph of the Truncated Icosahedron and the Last Letter of Galois // Notices of the American Mathematical Society. 1995. V.42. No.9. P.959-968.
185. Agol I. 2000. Thurston's congruence link.
<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.121.3407&rep=rep1&type=pdf>
186. Sevov S. C., Corbett J. D. A Remarkable Hypoelectronic Indium Cluster in K8In11 // Inorganic Chemistry. 1991. V.30. P.4875–4877.
187. Lee S., Henderson R., Kaminsky C., Nelson Z., Nguyen J., Settje N. F., Schmidt J. T., Feng J. Pseudo-fivefold diffraction symmetries in tetrahedral packing // Chemistry. A European Journal. 2013. V.19. No.31. P.10244-10270.
188. Elser V., Sloane N. J. A. A Highly Symmetric Four-Dimensional Quasicrystal // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1987. V.20. P.6161–6168.
189. Singerman D. Klein's Riemann Surface of Genus 3 and Regular Imbeddings of Finite Projective Planes // Bulletin of the London Mathematical Society. 1986. V.18. P.364-370.
190. Rivier N. Statistical Thermodynamics of Foam // In: Foams and Emulsions. Ed. by Sadoc J.F. & Rivier N. pp.105-125. Dordrecht: Kluwer. 1999. 596 p.
191. King R. B. Polyhedral Dynamics and the Jahn–Teller Effect // In: Fluxional Organometallic and Coordination Compounds. (Physical Organometallic Chemistry, V.4). Gielen M., Willem R., Wrackmeyer B., eds. Chichester: Wiley. 2004. 323 p. pp.1-39.
192. Conway J. H., Curtis R. T., Norton S. P., Parker R. A., Wilson R. A. Atlas of Finite Groups. Oxford: Clarendon Press. 1985. 286 p.
193. Császár A. A polyhedron without diagonals // Acta Scientiarum Mathematicarum Universitatis Szegediensis. 1949. V.13. P.140–142.
194. Szilassi L. On three classes of regular toroids // 3rd International Conference APLIMAT-2004. Plenary Lecture. Department of Mathematics, Faculty of Mechanical Engineering, Slovak University of Technology in Bratislava, 2004. P.173-189.
195. Thurston W. P. How to see 3-manifolds // Classical Quantum Gravity. 1998. V.15. No.9. P.2545–2571.
196. Görner M. Regular Tessellation Link Complements // arXiv:1406.2827v3 [math.GT]. 2016.

197. Zheng C., Hoffmann R., Nelson D. R. A Helical Face-Sharing Tetrahedron Chain with Irrational Twist, Stella Quadrangula, and Related Matters // Journal of the American Chemical Society. 1990. V.112. No.10. P.3784-3791.]
198. Babiker H., Janeczko S. Combinatorial representation of tetrahedral chains // Communications in Information and Systems. 2015. V.15. No.3. P.331-359.
199. Martin P., Singerman D. The geometry behind Galois' final theorem // European Journal of Combinatorics. 2012. V.33. No.7. P.1619-1630.
200. White A. T. Efficient imbeddings of finite projective planes // Proceedings of the London Mathematical Society. 1995. V.s3-70. No.1. P.33-55.
201. Brehm U., Kühnel W. Equivelar maps on the torus // European Journal of Combinatorics. 2008. V.29. P.1843–1861.
202. Mason J. H. Can regular tetrahedra be glued together face to face to form a ring? // The Mathematical Gazette. 1972. V.56. P.194-197.
203. Altshuler A. Polyhedral realization in R3 of triangulations of the torus and 2-manifolds in cyclic 4-polytopes // Discrete Mathematics. 1971. V.1. No.3. P.211-238.
204. Bokowski J., Eggert A. All realizations of Möbius torus with 7 vertices // Structural Topology. 1991. No.17. P.59–78.
205. Stojanović M. 2-toroids and their 3-triangulation // Kragujevac Journal of Mathematics. 2017. V.41. No.2. P.203-217.
206. Koptsik V. A. Generalized symmetry in crystal physics // Computers and Mathematics with Applications. 1988. V.16. No.5-8. P.407-424.
207. Chechin G. M., Koptsik V. A. Relation between Multidimensional Representations of the Fedorov Groups and the Groups of Color Symmetry // Computers and Mathematics with Applications. 1988. V.16. No.5-8. P.521-536.
208. Liebeck M. W., Praeger C. E., Saxl J. Regular Subgroups of Primitive Permutation Groups // Memoirs of the American Mathematical Society. 2010. V.203. No.952. Art. PII_S0065-9266(09)00569-9. P.1-71.
209. Li C. H., Xia B. Factorizations of almost simple groups with a solvable factor, and Cayley graphs of solvable groups // arXiv:1408.0350v3 [math.GR]. 2016. 107 p.
210. Dechant P.-P., Böhm C., Twarock R. Affine extensions of non-crystallographic Coxeter groups induced by projection // arXiv:1110.5228v2 [math-ph]. 2012.
211. Shioda T. Plane quartics and Mordell-Weil lattices of type E7 // Commentarii mathematici Universitatis Sancti Pauli. 1993. V.42. No.1. P.61-79.
212. Kumar A., Shioda T. Multiplicative excellent families of elliptic surfaces of type E7 or E8 // arXiv:1204.1531v3 [math.AG] 26 Jan 2015.

213. Zandi R., Reguera D., Bruinsma R. F., Gelbart W. M., Rudnick J. Origin of icosahedral symmetry in viruses // Proceedings of the National Academy of Sciences of the U.S.A. 2004. V.101. No.44. P.15556-15560.
214. King R. B. Unusual permutation groups in negative curvature carbon and boron nitride structures // Croatica Chemica Acta 2000. V.73. No.4. P.993-1015.
215. Nyman H., Carroll C. E., Hyde B. G. Rectilinear rods of face-sharing tetrahedra and the structure of β -Mn // Zeitschrift für Kristallographie. 1991. V.196. Nos.1-4. P.39-46.
216. Sadler G., Fang F., Kovacs J., Irwin K. Periodic modification of the Boerdijk-Coxeter helix (tetrahelix) // arXiv:1302.1174v1 [math.MG], 2013.
217. Hartl H., Mahdjour-Hassan-Abadi F. $[(C_6H_5)_4P]_\infty^1[Cu_3I_4]$ -The First Compound with a Helical Chain of Face-Sharing Tetrahedra as a Structural Element // Angewandte Chemie International Edition. 1994. V.33. No.18. P.1841-1842.
218. Kumar S., Bansal M. Geometrical and sequence characteristics of α -helices in globular proteins // Biophysical Journal. 1998. V.75. No.10. P.1935–1944.
219. Шульц Г. Е., Ширмер Р. Х. Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982. 354 с.
220. Pauling, L., Corey, R. B. & Branson, H. R. The structure of proteins: two Hydrogen-bonded helical configurations of the polypeptide chain // Proceedings of the National Academy of Sciences of the U.S.A. 1951. V.37. No.4. P.205-211.
221. Crick F. H. C. Is α -keratin a coiled coil? // Nature 1952. V.170. No.4334. P.882-883.
222. Sadoc J. F. Helices and helix packings derived from the {3; 3; 5} polytope // The European Physical Journal E. 2001. V.5. P.575-582.
223. Финкельштейн А. В., Птицын О. Б. Физика белка. М.: КДУ, 2012. 524 с.
224. Teo B. K., Shi X., Zhang H. Cluster of Clusters. Structure of a Novel Cluster $[(Ph_3P)_{10}Au_{13}Ag_{12}Br_8](SbF_6)$ Containing an Exact Staggered-Eclipsed-Staggered Metal Configuration. Evidence of Icosahedral Units as Building Blocks // Journal of the American Chemical Society. 1991. V.113. No.11. P.4329-4331.
225. Бернал Дж. О структуре жидкости // В кн.: Рост кристаллов. М.: Наука. 1965. Т.5. С.149–162.
226. Ivrissimtzis I., Singerman D. Regular maps and principal congruence subgroups of Hecke groups // European Journal of Combinatorics. 2005. V.26. P.437-456.
227. Lavrenchenko S. A. Irreducible triangulations of the torus // Journal of Soviet Mathematics (Journal of Mathematical Sciences). 1990. V.51. No. 5. P.2537–2543.
228. Sarti C. Automorphism Groups of Wada Dessins and Wilson Operations. PhD Dissertation. Frankfurt, 2010. 129 p.

229. O'Reilly-Regueiro E. Biplanes with flag-transitive automorphism groups of almost simple type, with classical socle // Journal of Algebraic Combinatorics. 2007. V.26: P.529–552.
230. Richter D. How to Make the Mathieu Group M_{24}
<http://homepages.wmich.edu/~drichter/mathieu.htm>
231. Coxeter H. S. M. Regular and semi-regular polytopes III. // Mathematische Zeitschrift. 1988. V.200. P.3-45.
232. Mosseri R., Sadoc T. F. Geometrical frustration. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 370 p.
233. Вайнштейн Б. К. Современная кристаллография. Т.2. М.: Наука, 1979. 355 с.
234. Шевельков А. В. Супрамолекулярные клатраты: от экзотических веществ к материалам нового поколения // Соровский образовательный журнал. 2004. Т.8. №2. С.44-49.
235. Бернал Дж. О роли геометрических факторов в структуре материи // Кристаллография. 1962. Т.7. № 4. С.507-519.
236. Lord E. A. Helical Structures: The Geometry of Protein Helices and Nanotubes // Structural Chemistry. 2002. V.13. Nos.3/4. P.305-314.
237. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд. АН СССР. 1947. 145 с.
238. Моисеев И. И., Варгафтик М. Н. Кластеры и коллоидные металлы в катализе // Журнал общей химии. 2002. Т. 72. № 4. С. 550-560
239. Талис А. Л. Плотные геликоидальные упаковки шаров и закономерности строения тетраэдрических и тетракоординированных упорядоченных структур / Сборник Трудов VI Всероссийской научной школы “Математические исследования в естественных науках”. Апатиты, Геологический институт КНЦ РАН, 2010. С.75-89.
240. Koptsik V. A. Advances in theoretical crystallography. Colour symmetry of defect crystals // Kristall und Technik. 1975. V. 10. No.3. P. 231-245.
241. Копчик В. А. Теретико-групповые методы в физике реальных кристаллов и теории структурных фазовых переходов // В кн.: Теоретико-групповые методы в физике. М.: Наука, 1980. Т. 1. С. 368-381.
242. Шубников А. В., Копчик В. А. Симметрия в науке и искусстве. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. С.276-321.
243. Копчик В. А. Принципы симметризации-диссимметризации Шубникова-Кюри для составных физических систем. В кн.: Проблемы современной кристаллографии. Сб. статей памяти академика А. В. Шубникова. М.: Наука, 1975. С.42-60.
244. Robinson G. de B. On the orthogonal group in four dimensions // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1931. V.27. No.1. P.37-48.

245. Cook H. W., McMaster C. R. Fatty acid desaturation and chain elongation in eukaryotes // In: New comprehensive biochemistry. Biochemistry of Lipids, Lipoproteins and Membranes. V.36. Eds. D.E. Vance, J.E. Vance. 4th ed. Elsevier Science. 2002. 648 p. (P.181–204).
246. Methods in Membrane Lipids (Methods in Molecular Biology 1232, Springer Protocols). D.M. Owen, ed. N.Y., Heidelberg, Dordrecht, London: Springer (Humana Press). 2015. 327 p.
247. Mouritsen O. G., Bagatolli L. A. Life - As a Matter of Fat. Lipids in a Membrane Biophysics Perspective (The Frontiers Collection). Heidelberg, N.Y., Dordrecht, London: Springer. 2016. 298 p.
248. Ruberman D., Starkston L. Topological Realizations of Line Arrangements // International Mathematics Research Notices. 2019. V.2019. No.8. P.2295–2331 (advance access publication: August 24, 2017, doi.org/10.1093/imrn/rnx190); arXiv:1606.01776v1 [math.GT] 6 Jun 2016.
249. Oxley J. G. Matroid Theory. N.Y.: Oxford University Press. 1992. 532 p.
250. Gordon G., McNulty J. Matroids: A Geometric Introduction. Cambridge etc.: Cambridge University Press. 2012. 393 p.
251. Miyata H. On symmetry groups of oriented matroids // arXiv:1301.6451v5 [math.CO] 11 Jun 2015.
252. Гельфанд И. М., Серганова В. В. Комбинаторные геометрии и страты тора на однородных компактных многообразиях // Успехи математических наук. 1987. Т.42. Вып. 2(254). С.107-134.
253. Crapo H. H., Rota G. G. On the foundation of combinatorial theory. Cambridge, Mass.: M.I.T. Press, 1970. Combinatorial Geometries.
254. Ильев А. В., Ильев В. П. Характеризация матроидов в терминах поверхностей // Прикладная дискретная математика. 2016. №3(33). С.5-15.
255. Glynn D. G. Theorems of points and planes in three-dimensional projective space // Journal of the Australian Mathematical Society. 2010. V.88. No.1. P.75-92.
256. Conway J. H., Elkies N. D., Martin J. L. The Mathieu group M_{12} and its pseudogroup extension M_{13} // Experimental Mathematics. 2006. V.15. No.2: P.223-236.
257. Totaro B. Splitting fields for E_8 -torsors // DUKE Mathematical Journal. 2004. V.121. No.3. P.425-455.
258. Yasushi I. Propagating local positional order in tetrahedrally bonded system // Acta crystallographica. Section A. 1988. V.44. P.987-998.

259. Dmitrienko V. E., Kléman M. Tetrahedral Structures with Icosahedral Order and Their Relation to Quasicrystals // Кристаллография. 2001. Т.46. №4. С.591-597.
260. Dmitrienko V. E., Kléman M., Mauri F. Quasicrystal-related phases in tetrahedral semiconductors: Structure, disorder, and *ab initio* calculations // Physical Review. Ser. B. Condensed matter and materials physics. 1999. V.60. No.13. P.9383-9389.
261. Crain J., Ackland G. J., Maclean J. R., Piltz R. O., Hatton P. D., Pawley G. S. Reversible pressure-induced structural transitions between metastable phases of silicon // Physical Review B. 1994. V.50. No.17. P.13043-13046.
262. Хорнстра Дж. Дислокации в решетке алмаза // В кн.: Дефекты в кристаллах полупроводников. М.: Мир. 1969. С.15-37; Хорнстра Дж. Модели межзеренных границ в решетке алмаза. Там же, С.72-99.
263. Хорнстра Дж. Модели межзеренных границ в решетке алмаза // В кн.: Дефекты в кристаллах полупроводников. М.: Мир. 1969. С.72-99.
264. Schmitz J., Peters J., Trebin H.-R. Z. An icosahedral quasicrystalline for amorphous semiconductor // Physical Review B. 1996. V.100. P.57-62.
265. Tolbert S. H., Herhold A. B., Brus L. E., Alivisatos A. P. Pressure-Induced structural transformations in Si nanocrystals: surface and shape effects // Physical Review Letters. 1996. V.76. No.23. P.4384-4387.
266. Chadi D. J. New crystalline structures for Si and Ge // Physical Review B. 1985. V.32. P.6485-6489.
267. Gruttner A., Nesper R., Schnerring H. G. Neue metastabile Germanium-Modificationen *allo*-Ge und 4H-Ge aus Li₇Ge₁₂ // Angewandte Chemie. 1982. V.94. No.12. P.933.
268. Moody R. V., Patera J. Voronoi and Delaunay cells of root lattices: classification of their faces and facets by Coxeter-Dynkin diagrams // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1992. V.25. P.5089-5134.
269. Федоров Е. С. Симметрия и структура кристаллов. М: АН СССР. 1949. 630 с.
270. Холл М. Теория групп. М.: ИЛ. 1962. 468 с.
271. Копчик В. А., Коцев И. Н. К теории и классификации групп цветной симметрии. II. W – симметрия. Сообщения ОИЯИ, Р4 – 8068. Дубна, 1974. 17 с.
272. Samoilovich M. I., Talis A. L. Structural realization of a fibre space technique and other algebraic geometry constructions as a foundation for the theory of nanostructural symmetry // In: Nanostructures and photon crystals. Moscow: Central Research Technological Institute “Technomash”. 2004. P.8-114.
273. Hyde S. T. Sponges // In: Foams and Emulsions (Ed. by J. F. Sadoc and N. Rivier). London: Kluwer Academic Publishers, 1999. P.437-469.

274. Тужилин А. А., Фоменко А. Т. Элементы геометрии и топологии минимальных поверхностей. М.: Наука, 1991. 175 с.
275. Арнольд В. И. Теория катастроф. М.: УРСС, 2004. 128 с.
276. Polk D. E. Structural model for amorphous silicon and germanium // Journal of Non-Crystalline Solids. 1971. V.5. P.365-376.
277. Connel G. A. N., Temkin R. J. Modeling the structure of amorphous tetraedrally coordinated semiconductors // Physical Review B. 1974. V.9. No.12. P.5323-5326.
278. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск: Наука, 1998. 333 с.
279. Дядин Ю. А., Гущин А. Л. Газовые гидраты // Соросовский образовательный журнал. 1998. №3. С.55-64
280. Walsh M. R., Koh C. A., Sloan E. D., Sum A. K., Wu D. T. Microsecond Simulations of Spontaneous Methane Hydrate Nucleation and Growth // Science. 2009. V.326. No.5956. P.1095-1098.
281. Delgado-Friedrichs O., O'Keeffe M. Isohedral simple tilings: Binodal and by tiles with =16 faces // Acta Crystallographica. A. 2005. V.61. No.3. P.358-362.
282. Либай Ф. Структурная химия силикатов. М.: Мир, 1988. 412 с.
283. Weaire D.; Phelan R. A counter-example to Kelvin's conjecture on minimal surfaces // Philosophical Magazine Letters. 1994. V.69. No.2. P.107–110.
284. Komarov V. Yu., Solodovnikov S. F., Grachev E. V., Kosyakov V. I., Manakov A. Yu., Kurnosov A. V., Shestakov V. A. Phase Formation and Structure of High-Pressure Gas Hydrates and Modeling of Tetrahedral Frameworks with Uniform Polyhedral Cavities // Crystallography Reviews. 2007. V.13. N4. P.257–297.
285. O'Keeffe M. Sphere Packings and Space Filling by Congruent Simple Polyhedra // Acta Crystallographica. A. 1998. V.54. No.3. P.320-329.
286. Melinon P., Paillard V., Dupuis V., Perez J. P., Perez A., Panczer G. Synthesis of diamond nanocrystallites using the low-energy cluster beam deposition; An indirect proof of small fullerene existence? // Carbon. 1994. V.32. No.5. P.1011-1013.
287. Dmitrienko V. E., Kleman M. Icosahedral order and disorder in semiconductors // Philosophical Magazine Letters. 1999. V.79. P. 359-367.
288. Веселов И. Н., Талис А. Л., Ронова И. А., Терещенко Г. Ф. Молекулярно-динамическое моделирование фазового перехода газогидрат - лед // XV Симпозиум по межмолекулярному взаимодействию и конформациям молекул. 14-18 июня 2010 года, Петрозаводск. Тезисы докладов. С.69.

289. Yee D. P., Chan H. S., Havel T. F., Dill K. A. Does compactness induce secondary structure in proteins? A study of poly-alanine chains computed by distance geometry // Journal of Molecular Biology. 1994. V.241. P.557-573.
290. Lu C. H, Huang S. W, Lai Y. L, Lin C P, Shih C H, Huang C C, Hsu W L, Hwang J K. On the relationship between the protein structure and protein dynamics // Proteins. 2008. V.72. P.625-634.
291. Olsen K., Bohr J. The generic geometry of helices and their close-packed structures // Theoretical Chemistry Accounts. 2010. V.125. Nos.3-7. P.207-215.
292. Буземан Г., Келли П. Проективная геометрия и проективные метрики. Изд. 2, испр. URSS. 2010. 408 с.
293. Lam W. Y., Pinkall U. Isothermic Triangulated Surfaces // arXiv:1501.02587v2. 2015.
294. Bobenko A., Pinkall U. Discrete Isothermic Surfaces // Journal für die reine und angewandte Mathematik. 1996. V.475. P.187-208.
295. Иванов А. О., Мищенко А. С., Тужилин А. А. Геометрия ломаных и полипептидов // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2014. Т.10. №1. С.39–47.
296. Petsko G. A., Ringe D. Protein Structure and Function. London: New Science Press Ltd. 2004. 179 p.
297. Banavar J. R., Maritan A. Physics of Proteins // Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure. 2007. V.36. P.261-280.
298. Woolfson D. N. Coiled-Coil Design: Updated and Upgraded // In: Fibrous Proteins: Structures and Mechanisms, Subcellular Biochemistry 82, D.A.D. Parry, J.M. Squire (eds.), 2017. P.35-61.
299. Hartmann M., Mendler C., Bassler J., Karamichali I., Ridderbusch O., Lupas A., Alvarez B. // eLife. 2016. V.5. P.11861-11884.
300. Lupas A. N., Gruber M. The structure of α -helical coiled coils // Advances in Protein Chemistry. 2005. V.70. P.37-78
301. Chothia C., Levitt M., Richardson D. Helix to helix packing in proteins // Journal of Molecular Biology. 1981. V.145. P.215-250.
302. Offer G., Hicks M. R., Woolfson D. N. Generalized Crick Equations for Modeling Noncanonical Coiled Coils // Journal of Structural Biology. 2002. V.137. P.41–53.
303. Murzin A. G., Finkelstein A. V. General architecture of the α -helices globule // Journal of Molecular Biology. 1988. V.204. P.749-769.
304. Tarnai T., Fowler P. W. Packing of twinned circles on a sphere // Proceedings of the Royal Society. A. 2006. V.462. P.3733–3747.