На правах рукописи

ТАЛИС Александр Леонидович

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

Специальность 01.04.18 – кристаллография,
физика кристаллов

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН (ИНЭОС РАН)»

Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН **Дмитриенко Владимир Евгеньевич**
	доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Математического института им. В.А. Стеклова РАН **Долбилин Николай Петрович**
	доктор химических наук, профессор, профессор кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова **Белоконева Елена Леонидовна**
Ведущая организация:	Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского»

Защита диссертации состоится «___» _________ 2021г. в __ часов __ мин. на заседании диссертационного совета Д 002.114.01 при ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН по адресу: 119333, г. Москва, Ленинский пр., 59, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
https://www.crys.ras.ru/dissertatsionnyj-sovet/zashchity-dissertatsij

Автореферат разослан «____» ___________ 2021г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 002.114.01
кандидат физико-математических наук Фролов К.В.

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы. Кристаллической структуре соответствует разбиение на многогранники (полиэдры) 3-мерного евклидова пространства E^3, симметрию которого соответствующая федоровская (пространственная) группа может отображать 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 не дают. 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.

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[2]. 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[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.

Таким образом, **актуальным** является **адекватное** отображение симметрии упорядоченных (не только кристаллических) тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров (или m-вершинных, $4 \leq m \leq 10$, объединений тетраэдров), структурными представлениями математических конструкций.

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, $4 \leq m \leq 10$, 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[1-12,15,16,18-36,38] (см. также [1-7]), которые образуют базу развиваемой 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.

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 (тетраблока), универсальной для сборки упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров;

– построена система m-вершинных, $4 \leq m \leq 10$, 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 “тетраблочных” спиралей (отношение шага к радиусу и шаговый угол) с точностью до нескольких процентов отвечают параметрам полипетидной 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 выявлять упорядоченные (не только кристаллические) тетраэдрические и тетракоординированные структуры, обладающие высокой (некристаллографической) симметрией. В частности, развиваемый подход может быть основой для выделения из широкого класса линейных (био)полимеров, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров, высокосимметричных полимеров, группы симметрии которых вкладываются в группу симметрии решетки E_8 или группу Матье M_{24}.

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 *априори* 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 ~2%, однотипно объединенных по торцевым граням, как приближение идеального высокосимметричного образца полипетидной 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).

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" (Drezden, 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 (Суздаль, 2015); XIV Российской конференции “Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов” (Екатеринбург, 2015); VIII и IX Национальной кристаллохимической конференции (Суздаль, 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. Несмеянова РАН (Москва, 2010 - 2017).

Публикации. Основные материалы диссертации представлены в **7** главах в книгах [1-7] и в **56** опубликованных работах [8-63] в рецензируемых научных журналах; из них **35** – в центральных российских журналах и **21** – в международной печати. Кроме того, по теме диссертации опубликовано **30** статей в сборниках статей, **12** кратких сообщений в журналах, 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. Несмеянова РАН. В процессе выполнения отдельных ее этапов она была поддержана:

– грантами отделения химии и наук о материалах РАН
ОХНМ-7 (Динамика образования и изучение строения клатратных гидратов, 2003-2005), ОХНМ-7 (Теоретическое и экспериментальное исследование фазового перехода “газогидрат-лед”, 2006-2008), ОХНМ-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, осуществляемое 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), 08-02-13500офи_ц (Разработка и исследование свойств магнитных метаматериалов на основе опаловых матриц (правильных упаковок наносфер SiO_2), пригодных для применения в СВЧ-устройствах, 2008-2009), 09-02-13531офи_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 SiO_2 с заполнением межсферических нанополостей мультиферроиками тороидального типа (ферротороидные системы), 2011-2012), 14-02-00079_а (Кристаллохимическая модель эвтектоидного превращения в системе железо-углерод, 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”.

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

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. Бульенкову, 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. Степенщикову, д.ф.-м.н. А.Л. Рабиновичу. Автор благодарен зав. лабораторией физической химии полимеров Института элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН академику РАН, д.ф.-м.н. А.Р. Хохлову, поддержавшему данное направление исследований, и всему коллективу лаборатории за доброжелательное отношение.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** изложены проблемы, связанные с описанием изучаемых структур при отсутствии разработанного здесь симметрийного аппарата; аппарат необходим для отображения некристаллографической симметрии упорядоченных тетраэдрических и тетракоординированных структур. Обозначен общий круг вопросов, рассматриваемых в диссертационной работе, сформулированы цели, задачи, пути их решения, 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. Введены и описаны все основные понятия, которые будут использованы в диссертационной работе.

В разделе 1.1 рассмотрены (r, R)-системы точек Делоне и теорема локальности[28]. Согласно теореме локальности, во всех трех пространствах (евклидовом, сферическом и Лобачевского) любого числа измерений для правильности (r, R)-системы (где r и R числа, характеризующие расстояния в системе), достаточно конгруэнтности некоторых небольших конечных, так называемых стабильных «паучков» всех ее точек. Описаны федоровские группы и конструкции алгебраической геометрии.

В разделе 1.2 рассмотрены полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала, в разделе 1.3 – N-мерные платоновы тела (политопы) и соты. Рассмотрено разбиение трехмерной сферы S^3 (погруженной в 4-мерное евклидово пространство E^4 и имеющей с E^3 лишь одну общую точку) на 600 правильных тетраэдров, которые образуют 4-мерный аналог икосаэдра[6,21-23] – политоп {3,3,5}. В разделе 1.4 описаны решетки (системы) корней, диаграммы Коксетера – Дынкина, группы Вейля. Отмечено, что группа отражений (группа Вейля) G может быть описана с помощью диаграммы Коксетера – Дынкина, представляющей собой граф, каждая вершина которого соответствует отражающей плоскости и две вершины соединены ребром с отметкой *p,* если угол между соответствующими плоскостями равен π/p. Каждая отражающая гиперплоскость определяется перпендикулярным к ней вектором, называемым *корневым вектором* (или просто *корнем).* Корневые векторы, перпендикулярные к стенкам фундаментальной области, называются *простыми корнями,* а все множество корней называется *системой корней.* Группа G "размножает" множество простых корней до всей системы корней Ф. Произведение всех порождающих отражений имеет порядок *h,* называемый *числом Коксетера*. Бесконечная *группа отражений,* называемая *аффинной группой Вейля,* получается присоединением всех сдвигов на корневые векторы, ее диаграмма получается добавлением еще одной вершины к диаграмме для конечной группы[16]. При определенных условиях[27] некоторые из простых корней становятся "зависимыми", и возможен переход к относительной системе корней Ф'. Система корней Ф' имеет тип C_r (соответственно BC_r), если Ф – типа A_{2r-1} (соответственно A_{2r}); тип F_4, если Ф – типа E_6; тип B_r, если Ф – типа D_{r+1}; тип G_2, если Ф – типа D_4.

Далее описаны кристаллографическая 8-мерная решетка E_8 и расслоение Хопфа для политопов. Плотнейшая упаковка сфер S^7 в E^8 соотносится с уникальной решеткой корней E_8 - 8-мерной алмазной структурой[6]. Группой Вейля $W(E_8)$ решетки E_8 является точечная группа порядка $2^{14}\cdot 3^5\cdot 5^2\cdot 7$. Первую координационную сферу решетки E_8 образуют 240 векторов, которые (по гомоморфизму) соотносятся с кольцом из 120 икосианов, которым соответствуют вершины политопа {3,3,5} [6,21-23]. 240 минимальных векторов E_8 определяют полурегулярный политоп Госсета[23] $\{4_{21}\}$ и могут рассматриваться как 10 непересекающихся множеств (по 24 вектора в каждом), которые представляют собой дискретный вариант расслоения Хопфа. Базу такого расслоения образуют 10 вершин (∞, ±1, ±i, ±j, ±k, 0) расположенного на S^4 5-мерного аналога октаэдра {3,3,3,4}, а 24 вектора слоя определяют 4-мерный политоп {3,4,3}. Политоп {3,4,3} также можно рассматривать, как дискретный вариант расслоения Хопфа ($S^3 \rightarrow S^2$ (слой S^1)), в котором базу образуют вершины {0, ±1, ±i, ∞} октаэдра {3,4}, а слой {4} содержит 4 точки: {±1, ±i}. Если P – точка $(1/\sqrt{5})$ (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 первой координационной сферы E^8 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}. Группа отражений [3,3,5] может быть задана системой образующих подгрупп[19]. Эти подгруппы определяют подсистемы решетки корней H_4, которая может быть задана, например, парой подсистем.

В разделе 1.5. описаны блоковый дизайн, система Штейнера, коды, конечные проективные плоскости и конфигурации. По определению, t-(v,k,λ)-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 $b\cdot k = v\cdot r$, так что каждый элемент принадлежит r блокам[16].

Структура, содержащая n точек P_1, P_2, … P_n и n прямых l_1, l_2, … 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. Она однозначно строится по полю Галуа порядка q. Плоскость PG(2,q) однозначно определяется своей таблицей инцидентности (ТИ) представляющей собой квадратную таблицу n x n, в которой столбцы P_1, P_2, … P_n называются “точками”, а строки l_1, l_2, … l_n – ”прямыми”. Инцидентность точки P_i и прямой l_j определяется заполнением клетки ij (кружком) в этой таблице, пустая клетка означает отсутствие инцидентности[18].

Конечная проективная плоскость PG(2,q) является системой Штейнера t-$(v,k,1) = S(t,k,v) = S(2, q+1, q^2+q+1)$. Действительно, для PG(2,q) число точек v (столбцов в таблице инцидентности) и прямых b (блоков, т.е. 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 $b{\cdot}k = v{\cdot}r = (q^2+q+1)(q+1)$. Множество из m точек и n прямых, в котором через каждую точку проходит f прямых, а на каждой прямой лежат d точек, называется конфигурацией[18,20] (m_f, n_d). Самодуальные (m = n, f = d = 3) конфигурации, использованные в работе, представлены в таблице 1:

Таблица 1. Самодуальные конфигурации конечной проективной геометрии[30]

Конфигурация n_d	Пространство	Порядок группы	Граф или карта
Фано 7_3	PG(2,2)	336	$\{6, 3\}_{2,1}$
Мёбиуса-Кантора 8_3	Комплексная плоскость	96	$\{8\}+\{8/3\}$
Паппа 9_3	Действ. плоск.	216	$\{6, 3\}_{3,0}$
Дезарга 10_3	Действ. плоск.	240	$\{10\}+\{10/3\}$
Коксетера 12_3	Действ. плоск.	144	$\{12\}+\{12/5\}$ или $\{6, 3\}_{2,2}$

В разделе 1.6 описаны алгебраические группы. Указано, в частности, что группа $GL_n(q)$ – это множество матриц n x n с ненулевыми определителями над полем порядка q; 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 $LF_n(q)$. Только при q = 3, 5, 7, 11 группа $PSL_2(q)$ имеет транзитивные представления перестановками ровно q элементов, причем в каждом из этих случаев эти q элементов могут быть инволюциями, переставляющими (q+1) точку[16]. Некристаллографическую группу симметрии $PSL_2(7)$, изоморфную группе из 168 перестановок 7 чисел, составляют 168 матриц, отображающих на себя конечную проективную прямую из 7+1 точки. В качестве примеров алгебраических групп рассмотрены и группы Матье[16,19].

В главах 2-7 приведены результаты собственных исследований.

Вторая глава содержит 9 разделов и посвящена математическому определению тетраблока – базовой симметрийной единицы структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров. В ней также рассматриваются спиральные структуры из тетраблоков.

Показано, что в E^3 цепь из правильных тетраэдров, объединяемых по граням, может быть разбита на объединения тетраэдров, в которых число тетраэдров и вершин не меняется при их отображении в регулярные тетраэдрические разбиения пространств S^3 (H^3) постоянной положительной (отрицательной) кривизны. Базовая структурная единица цепи тетраэдров была определена как объединение тетраэдров, в котором при этом отображении число тетраэдров максимально возможно и соответствует триангулированной поверхности с числом вершин v, соответствующим треугольному вложению полного графа в “ориентируемую поверхность[26] рода $\boldsymbol{g}$”. Согласно[26], такая (наиболее симметричная) триангуляция поверхности возможна при $v = 0, 3, 4, 7 \pmod{12}$, поэтому тетраэдр $v = 4$ (рис.1***а***) удовлетворяет этому условию, а 5- и 6-вершинные объединения 2-х и 3-х правильных тетраэдров по граням - нет. Линейное 7-вершинное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров - тетраблок имеет допускающее максимальную симметрию значение $v = 7$ и удовлетворяет указанному выше определению базовой структурной единицы цепи тетраэдров.

Комбинаторная структура тетраэдра - биплоскость *2*-(4*,3,2*), рис.1***а***,***б***, является первой в последовательности биплоскостей; за ней следует биплоскость *2*-(7,4*,2*), рис.1***в***., к которой комплементарна схема 2-(7,3,1).

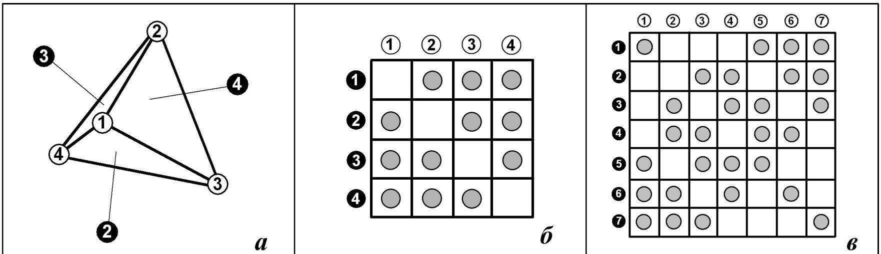


Рис.1. (***а***) тетраэдр; (***б***) таблица инцидентности блок-схемы 2-(4,3,2). Номера столбцов (строк) в белых(черных) кружках – номера вершин (граней) тетраэдра. Если вершина j принадлежит грани i тетраэдра, то в клетке $i\ j$ таблицы - имеется серый кружок, пустая клетка - отсутствие инцидентности; (***в***) - таблица инцидентности блок-схемы 2-(7,4,2).

Установлено, что схема 2-(7,3,1) (рис.2***а***) определяет комбинаторную структуру тетраблока, ее геометрической интерпретацией являются минимальная конечная проективная плоскость PG(2,2) (рис.2***б***), однозначно строящаяся по минимальному полю Галуа (состоящему из 0 и 1) и 7-вершинная регулярная триангуляция тора[31], рис.2***в***,***г***. Группой симметрии 2-(7,3,1)-схемы является PSL(2,7); показано, что ее строение определяет наличие энантиоморфных (левого и правого) вариантов тетраблока, которые взаимно трансформируются друг в друга через неэнантиоморфный (плоский) вариант тетраблока при сохранении 7 вершин, 15 ребер и 10 треугольных граней во всех вариантах (рис.3). Максимальная триангулированная структура с группой PSL(2,7) - это квартика Клейна.

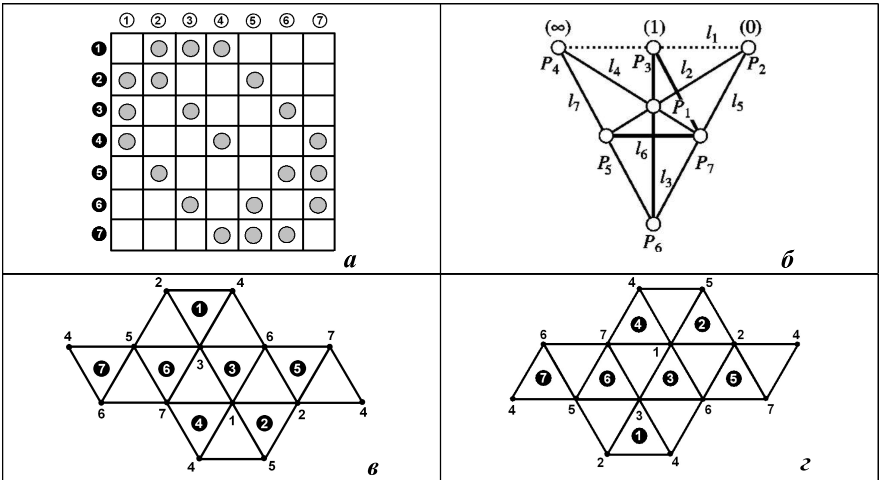


Рис.2. (***а***) - таблица инцидентности блок-схемы 2-(7,3,1). Любые два столбца содержат 2 знака инцидентности, принадлежащие одной строке; (***б***) - графическая модель минимальной конечной проективной плоскости PG(2,2). Параллельные прямые l_2, l_5; l_7, l_4 пересекаются в идеальных точках 0, ∞ бесконечно удаленной прямой l_1; (***в***) – *правый* и (*г*) - *левый* варианты развертки регулярно триангулированного тора, определяемые таблицей инцидентности (***а***).

Квартике Клейна соответствует регулярное разбиение $\{3,7\}_8$ части гиперболической плоскости на 56 треугольников (сходящихся по 7 в каждой вершине), из которых 14 треугольников однозначно соответствуют триангуляции тора[34] (рис.2***в***,*г*). Дуальное $\{3,7\}_8$ разбиение $\{7,3\}_8$ (рис.4) содержит 24 семиугольника, сходящихся по 3 в каждой вершине. Группу PSL(2,7), как расширение группы вращений октаэдра O циклической группой 7-го порядка C_7, “кристаллографически - наглядно” обозначать ^7O. Установлено, что при вложении в квартику Клейна $\{7,3\}_8$ правого (рис.2***в***, 4***а***) (левого (рис.2*г*, 4***б***)) 7-вершинного триангулированного тора каждая из его вершин совпадают со “стартовой” вершиной одного из 7 кубов, которые составляют ”правую” (”левую”) орбиту вершин подгруппы C_7 группы ^7O.

Показано, что симметрия тетраблока, обладающего точечной группой C_2 и вложением его вершин в квартику Клейна $\{7, 3\}_8$, определяется разложением группы ^7O на двойные смежные классы:

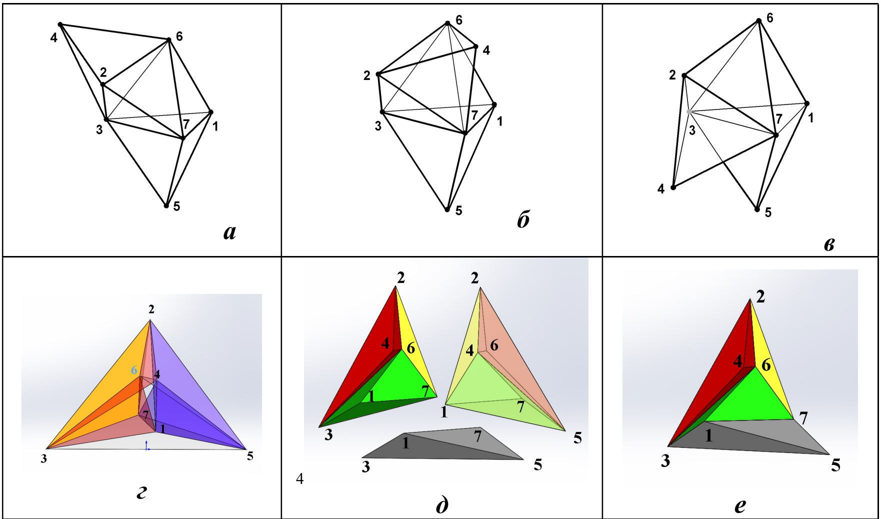


Рис.3. Три варианта тетраблока: (энантиоморфные) правый (***а***), левый (***б***) и (***в***) - плоский (неэнантиоморфный); (***г***) Объединение 7 неравнореберных тетраэдров, образующих многогранник Часара[35]; (***д***) раздельное представление тетраэдров многогранника Часара; (***е***) все вершины многогранника Часара охватываются объединением уже 4 тетраэдров.

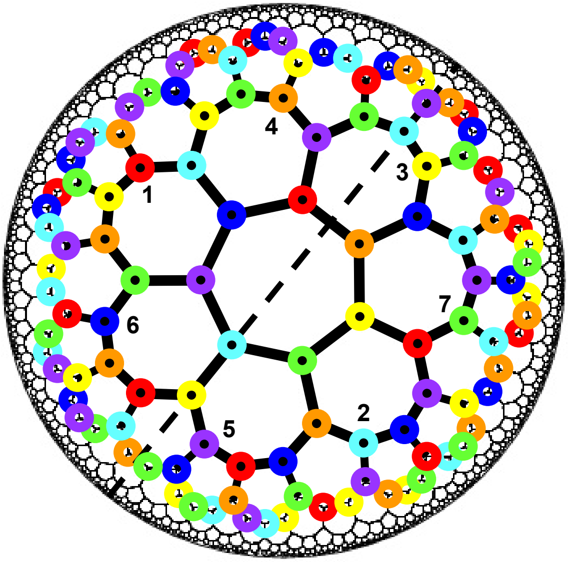
$$^{7}O=C_7\cdot O' = \bigcup_{i=1}^{7} g_iO' = \bigcup_{k=1}^{4} C_2g_kO' \quad \text{и} \quad ^{7}O= C_7\cdot O'' = \bigcup_{j=1}^{7} g_jO'' = \bigcup_{f=1}^{4} C_2g_fO'', \quad (1)$$

где группы O' и O'' не сопряжены в ^{7}O, $g_i, g_k \notin O'$, $g_j, g_f \notin O''$, $g_k, g_f \notin C_2$. Разложения (1) задают группы цветной W-симметрии $(^{7}O')^{w}$ и $(^{7}O'')^{w}$, изоморфные группе ^{7}O, в которых все элементы группы ^{7}O, кроме группы C_2, нагружены дополнительными преобразованиями. Аналогично (1), плоский тетраблок с точечной группой симметрии C_{2v} определяется разложением группы PGL(2,7) $= {}^{7}O_d$ на двойные смежные классы:

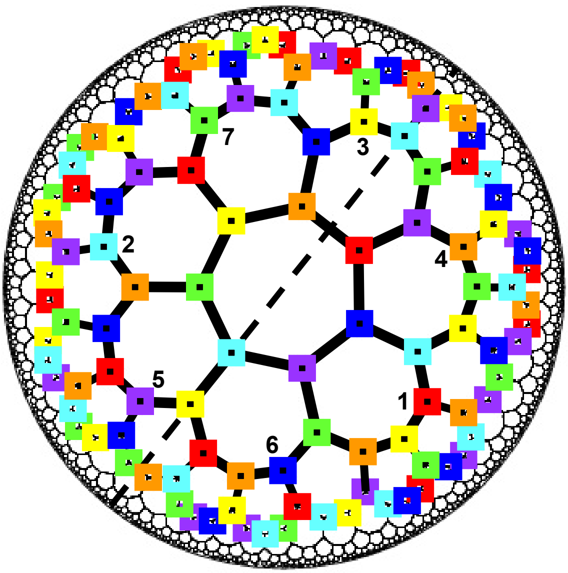
$$^{7}O_d = C_7\cdot (O : \sigma)=\bigcup_{n=1}^{4} (C_2 \times \sigma)\, g_n\, (O : \sigma), \qquad (2)$$

где преобразование σ - “гиперболическое зеркало” (символически показанное пунктиром на рис.4), прямое и полупрямое произведения групп $(C_2 \times \sigma)$ и $(O : \sigma)$ изоморфны, соответственно, группам C_{2v} и O_h.

В политопе {3,3,5} симметрия цепи из тетраблоков определяется произведением подгрупп группы $W(E_8)$ решетки E_8 в соотношении:



а



б

Рис.4. Два способа разбиения 56 вершин квартики Клейна $\{7,3\}_8$ на 7 кубов. (***а***) Кольца одного цвета указывают вершины одного *“правого” куба*; (***б***) – квадраты одного цвета указывают вершины одного *“левого” куба*. Зеркальное отражение относительно пунктирной линии переводит кольца (квадраты) на рис.***а***(***б***) в квадраты (кольца) того же цвета на рис.***б***(***а***). Номера вершин, отмеченные на рис.***а***,***б***, соответствуют номерам вершин на рис.2***в***,***г*** и номерам вершин тетраблоков на рис.3***а***,***б***.

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

где группы 2^2, 2^3 изоморфны группам D_2, D_{2h}; $(A_5 \times A_5)\mathbf{:}\ 2^2$ - группа симметрии политопа {3,3,5}, группа A_5 –изоморфна группе вращений икосаэдра, A_8 - знакопеременная группа[32] степени 8, в качестве группы G могут быть выбраны группы C_{15}, $C_3 \times D_{10}$ или их подгруппы. Для определения симметрии незамкнутых цепей из тетраблоков необходимо вместо конечной группы $W(E_8)$ использовать бесконечную аффинную группу Вейля $W_{af}(E_8)$ и соотношения между квартикой Клейна и решетками[33] типа E_7 и E_8.

Установлено, что введение тетраблока позволяет априори определить спиральные упаковки тетраблоков с некристаллографическими углами θ винтовых осей. При объединении двух тетраблоков одинаковой хиральности по торцевым треугольным граням возможно возникновение 3 вариантов, различающихся углами поворота ($\varphi = 0^o, 120^o, 240^o$) каждого последующего тетраблока относительно предыдущего. При $\varphi = 0^o$ воспроизводится (правая или левая) спираль Бердийка–Коксетера (тетраспираль) с иррациональным значением угла θ = 131.81…° (рис.5***б***) аппроксимантом которого является угол $132^0 = 360^0 \cdot 11/30$ оси 30/11(рис.5***а***, 6***а***), реализующейся в политопе {3,3,5}. При $\varphi = 120^o$ спиральная упаковка (допустимо деформированных) тетраблоков обладает винтовой осью 40/11 (вращение на угол $\theta = 99^0 = 360^0 \cdot 11/40$) и определяет экспериментальные параметры α-спирали с точностью до 2% [54]. При $\varphi = 240^o$ тетраблоки образуют спираль 10/3 (рис.6***б***), имеющую угол θ = 108°.

Материалы главы **2** опубликованы в работах [7, 45, 47, 54, 60].

В **третьей** главе описана система порождающих кластеров плотноупакованных тетраэдрических структур (металлов), упорядоченные структуры и их симметрийно-возможные трансформации, определяемые этой системой. Описаны нецелочисленные винтовые оси, определяемые решеткой E_8, тетраспирали с нецелочисленными винтовыми осями, гранецентрированная кубическая (ГЦК) - решетка как квадратная решетка непересекающихся спиралей из трансформированных тетраблоков, плотноупакованный кристалл β-Mn как пример сборки спиралей из тетраблоков. Рассмотрены некристаллографические (квазикристаллографические) закономерности сборки (порождающих) кластеров в подструктуры; в частности, "магический" кластер палладия Pd_{561} рассмотрен как подструктура декорированного политопа {3,3,5}.

Показано, что подсистема решетки H_4 (рис.7), соответствующей вершинам политопа {3,3,5}, позволяет задать объединение тетраэдров и/или триангулированный полиэдр, граф которого определяется триангуляцией тора, задаваемой конструкцией проективной (комбинаторной) геометрии.

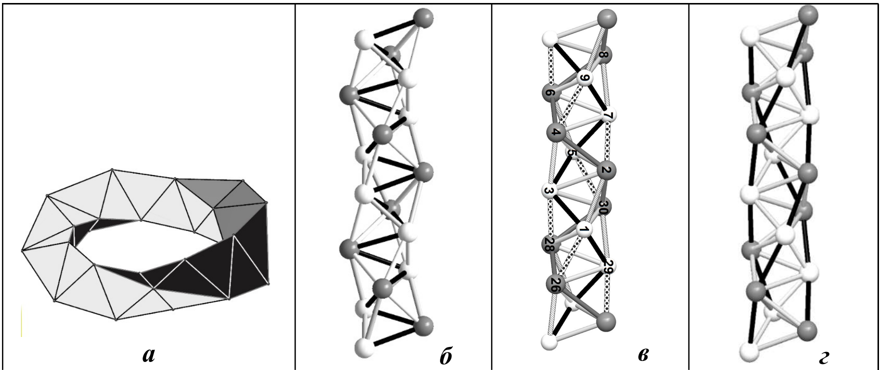


Рис.5. (***а***) Замкнутая в тор тетраспираль из 30 тетраэдров; (***б***) Спираль 30/11 (орбита ребер винтовой оси 30/11) в тетраспирали показана черным; (***в***) Спирали 15/4 (орбиты ребер винтовой оси 15/4) в тетраспирали показаны черным и серым. Винтовая ось 15/4 отображает заштрихованные ребра в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

Количество вершин n в таких кластерах, являющихся независимыми порождающими кластерами тетраэдрических структур (ПКТ), может быть от 4-х до 10-ти. Ограничение числа вершин определяется тем, что для каждого из таких кластеров существует n-вершинная конфигурация n_3 (табл.1), которая задает определяющую его триангуляцию тора, а триангуляция тора с любым числом вершин может быть сведена к комбинации триангуляций тора[36] с числом вершин, не превышающим 10 (уже 11-вершинный триангулированный кластер не является независимым, т.к. может быть представлен объединением по грани тетраэдра и 10-вершинника). Кроме того, полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала имеют число вершин, не больше 10.

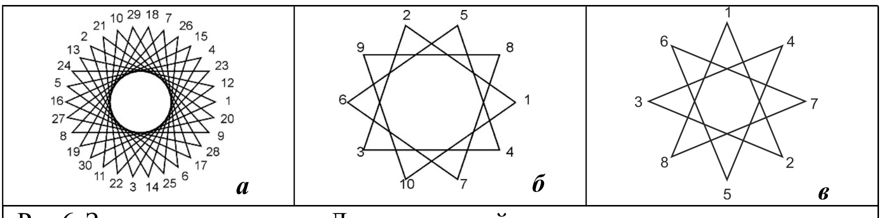


Рис.6. Звездчатые полигоны. Луч, выходящий из центра, пересекает:
(***а***) 11 сторон – в полигоне {30/11}; (***б***) 3 стороны – в полигоне {10/3};
(***в***) 3 стороны – в полигоне {8/3}.

Установлено, что существуют 37 таких ПКТ; они образуют "систему ПКТ" (табл.2), которая содержит все полиэдры пустоты и квазиячейки Бернала, в том числе линейный ($ПКТ_{18}$) и плоский ($ПКТ_{25}$) тетраблоки.

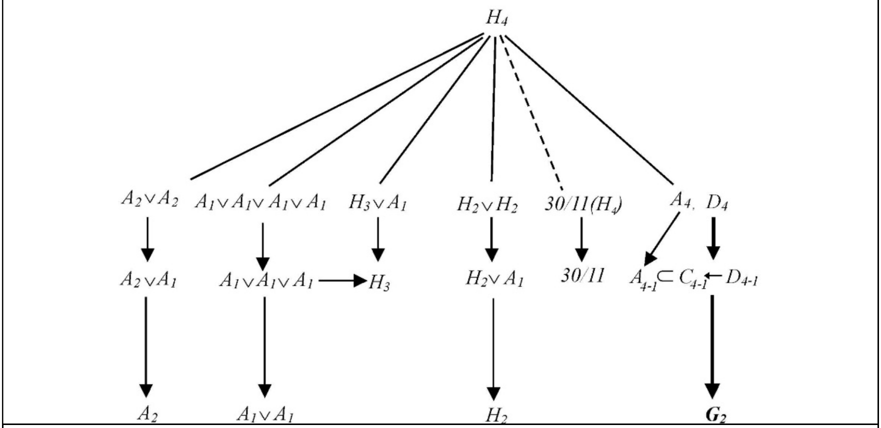


Рис.7. Иерархия подсистем некристаллографической системы корней H_4. В первой, второй и третьих строках схемы расположены 4, 3 и 2-мерные подсистемы корней. Символами A_{4-1}, C_{4-1} и D_{4-1} обозначены 3-мерные подсистемы систем A_4, C_4 и D_4. Жирные линии - схема k-квазиразложимости D_4 в G_2.

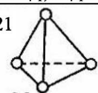
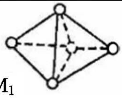
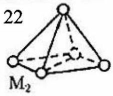
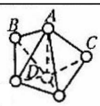
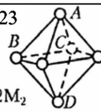
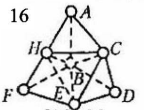
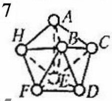
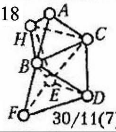
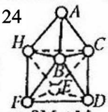
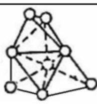
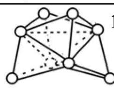
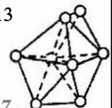
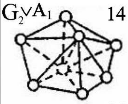
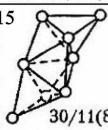
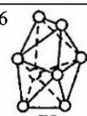
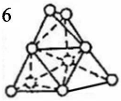
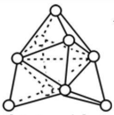
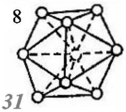
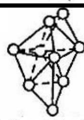
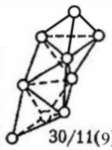
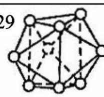
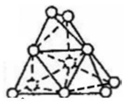
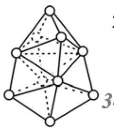
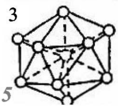
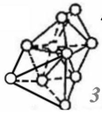
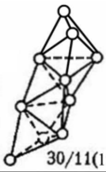
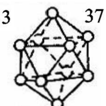
Показано, что решетка E_8 определяет особый класс винтовых осей (с вращением на угол $360^0 \cdot p/m$) порядка:

$$m/p = 2^{\gamma+1} I_n / k_{js} m_{js}, \qquad (4)$$

где $2^\gamma 8 I_n$ и $8I_n$ – число вершин из второй и первой координационных 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 подрешеток, вкладываемых в E_8. Определяемый (4) класс включает оси: кристаллографические (порядков 2, 3, 4, 6), квазикристаллографические (порядков 5, 8, 10, 12, 15, 30) и нецелочисленные. Среди нецелочисленных осей, помимо ранее известных[5,21], например, 30/11 (рис.6***а***), 15/4, 30/7, 30/13, 10/1, 10/3 (рис.6***б***), 8/3 (рис.6***в***) и др., впервые определены также оси 40/11, 18/5 и др.

В работе установлены теоретико-групповые соотношения связи между симметриями 30/11 и 8/3 (рис.6***а,в***), определяющими плотнейшую линейную упаковку: правильных тетраэдров в иррациональную тетраспираль (рис.5***б***) и тетраэдров с минимально-возможными искажениями (~2%) длин ребер в периодическую тетраспираль[8], реализующуюся, например, в плотноупакованном кубическом кристалле β-Mn.

Таблица 2. Система порождающих кластеров тетраэдрических структур

Объединения тетраэдров, определяемые подсистемами корней решетки H_4 и многоугольником Петри политопа {3,3,5}					Полиэдры 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  M_1
	20  $2M_1$				22  M_2
	19  $3M_1$				23  $2M_2$
16  $3M_1+M_1$		17  25 $5M_1$		18  30/11(7)	24  $2M_2+M_1$
11  M_1+16	12  $M_1^4+M_1$	13  27 M_1+17	$G_2 \vee A_1$ 14  $6M_1$ 28	15  30/11(8)	26  Z8
6  M_1^2+16	7  30 $2M_1+12$	8  31 $3M_1+17$	9  32 M_1+17+M_1	10  30/11(9)	29  Z9
1  M_1^3+16	2  34 $2M_1+12+2M_1$	3  35 $3M_1+2M_1+17$	4  36 $3M_1+17+M_1$	5  30/11(10)	33 37  Z10

Установлено, что в политопе {3,3,5} может быть выделена 60-вершинная спираль с осью 15/4, которая состоит из 15 тетраблоков (объединенных по грани), обвивает замкнутую в тор тетраспираль (рис.5***a***) и содержит все ее 30 вершин (рис.8). Показано, что при “выпрямлении” в E^3 две такие спирали, обвивающие периодическую тетраспираль, реализуются, например, в плотноупакованном кубическом кристалле β-Mn (рис.9***а***,***б***); вершины этой двойной спирали принадлежат также и тройной спирали из тетраблоков, объединенных по вершинам (рис.9***в***).

Показано, что в общем случае единообразное объединение одинаковых ПКТ генерирует спираль, ось m/p которой может определяться (4). Определенный набор ПКТ (некристаллографические конечные группы симметрии которых определяются группами конфигураций из табл.1) позволяет задать спирали, из которых могут быть собраны плотноупакованные тетраэдрические (металлические) структуры. Нефедоровская симметрия данного класса структур[8] определяется возможностью их вложения в решетку E_8, в (бесконечную) аффинную группу Вейля $W_{af}(E_8)$ которой может быть вложена федоровская группа.

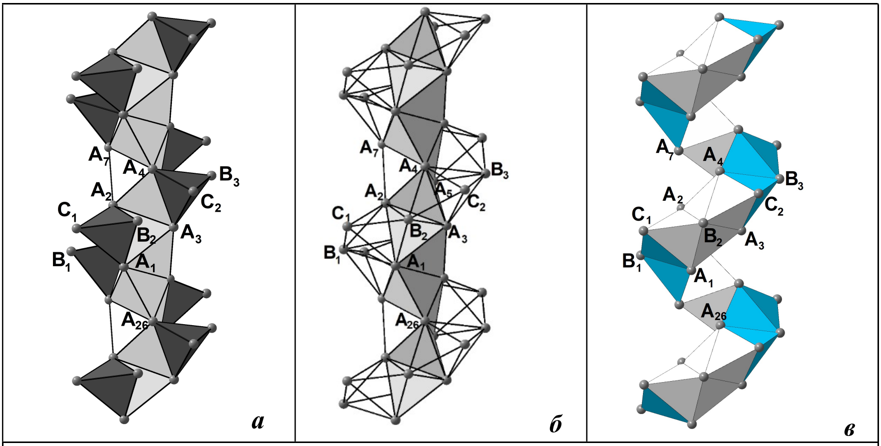


Рис.8. (***а***) Расширение тетраспирали правильными (темно-серыми) тетраэдрами, имеющими с ней только общие ребра; (***б***) Спираль из объединяемых по грани тетраблоков обвивает тетраспираль; (***в***) Обвивающая спираль (***б***) как объединение синих и белых тетраблоков.

Показано, что в высокосимметричном случае $ПКТ_{18}$ (тетраблока) 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. В этом случае рост симметрии объединений правильных тетраэдров по граням отвечает последовательности: тетраэдр – тетраблок – битетраблок – спираль из тетраблоков. В случае кубического кристалла β-Mn, который можно рассматривать в качестве квадратной решетки и из периодических тетраспиралей (вкладываемых в 6-мерную решетку[8] B_6), и из двойных обвивающих тетраспирали спиралей из тетраблоков (вкладываемых по (3) в политоп {3,3,5}), такое повышение симметрии определяется вложением кристалла β-Mn в решетку E_8.

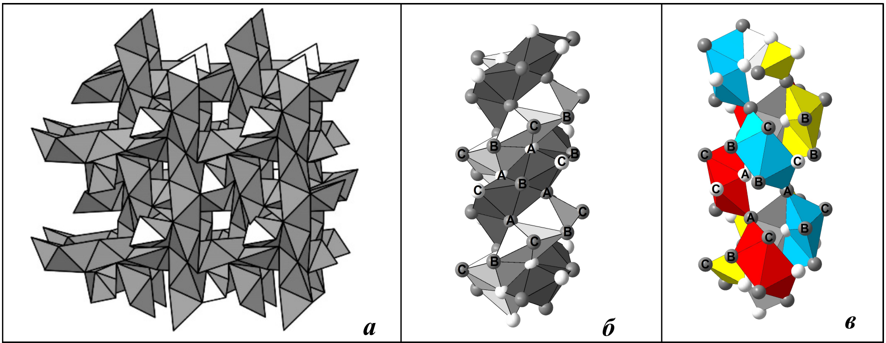


Рис.9. Плотноупакованный кубический кристалл β-Mn, рассматриваемый как квадратная решетка: (***а***) из периодических тетраспиралей (с локальными осями 8/3); (***б***) из двойных спиралей, обвивающих тетраспирали (а) и состоящих из тетраблоков, объединенных по граням; (***в***) из тройных спиралей, обвивающих тетраспирали (а) и состоящих из тетраблоков, объединенных по вершинам. Белые и серые шары - ионы марганца в разных зарядовых состояниях.

Установлено, что симметрийно-допустимые фазовые переходы между спиралями, собираемыми из ПКТ, определяются перебросками диагоналей в “ромбах”, образованных парами соседних треугольных граней. Эти переброски[7] (не сохраняющие расстояния между точками) трансформируют ПКТ друг в друга без изменения числа вершин ребер и граней. В частности, при замене в $ПКТ_{18}$ ребра BE ребром HF он трансформируется в одношапочный октаэдр - $ПКТ_{24}$ (табл.2), а $ПКТ_{19}$ в $ПКТ_{23}$ (рис.10***а***,***б***). Группа симметрии $ПКТ_{24}$ определяется аналогично (2) разложением:

$$^7O_d = \bigcup_{n=1}^{3} (C_3 : \sigma)\, g_n\, (O : \sigma). \qquad (5)$$

Показано, что одно из базовых понятий кристаллографии - плотнейшая кубическая упаковка (ГЦК–решетка) - является квадратной решеткой спиралей из $ПКТ_{24}$ (рис.10***в***). Эти спирали не имеют общих вершин и могут трансформироваться в спирали из ПКТ независимо друг от друга (рис.10***г***,***д***). В частности, спираль рис.10***в*** может быть трансформирована в спираль рис.8***в***.

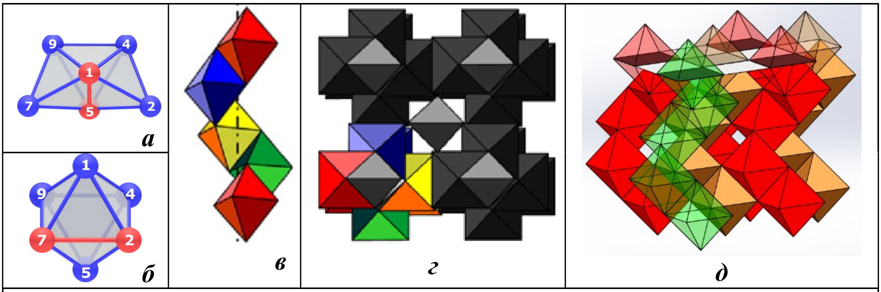


Рис.10. (***а***) Общее (красное) ребро в объединении трех тетраэдров – диагональ «ромба» из 2-х треугольников, его переброска трансформирует объединение в октаэдр (***б***); (***в***) Спираль 4_1 из граничащих по граням одношапочных октаэдров в ГЦК-решетке; (*г*) ГЦК–решетка как квадратная решетка спиралей (***в***), не имеющих общих вершин; (***д***) Изображенные на (*г*) спирали представлены тремя красными и одной полупрозрачной зеленой спиралями, не имеющими общих вершин, подобно образующейся в поперечном сечении шахматной доске, все вершины которой охватываются только половиной черных квадратов.

Материалы главы **3** опубликованы в работах [1-8, 10, 14, 18-24, 26-28, 30-35, 38, 39, 46, 48-53, 55-59, 61-63].

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, конфигурация Мебиуса – Кантора 8_3 и определяемое ею объединение двух полиэдров Бернала Z8, конфигурации $(9_3)_1$, $(9_3)_2$, $(9_3)_3$, их особые подконфигурации и определяемые ими кластеры, конфигурация Дезарга 10_3 и алломорфное отображение 20–вершинного кластера алмаза в додекаэдр. Также описаны конечные проективные плоскости PG(2,3), PG(2,4) и определяемые ими кластеры. Рассмотрена классификация тетракоординированных “политопов” в зависимости от угла синхронного вращения троек вершин 2-ой координационной сферы алмаза. Описаны кластеры алмазоподобных структур, содержащие икосаэдры в координационных сферах, несамодуальные и недезарговы конфигурации и определяемые ими порождающие кластеры алмазоподобных структур с сильно искаженными тетраэдрическими углами, порождающие кластеры углеводородноподобных цепей, процедура получения составного тетраблока и его вариантов.

Установлено, что граф порождающего кластера алмазоподобной структуры (ПК) определяется как подграф графа инцидентности конфигурации (табл.1) или конечной проективной геометрии PG(2,q), q = 2, 3, 4. В наиболее симметричном случае, $ПК_{i,j}$ – это невыпуклый полиэдр, образованный объединением (условно “белого”) ПКТ$_i$ и (условно “черного”) ПКТ$_j$ из системы ПКТ (табл.2) и обладающий N-вершинным, $8 \le N \le 20$ бихроматическим графом, в котором каждая белая вершина соединена с черной и наоборот. В частности, ПК, возникающие при объединении осью 2-го порядка и центром инверсии двух ПКТ$_{18}$ и двух ПКТ$_{24}$, соответственно, определяются подтаблицами ТИ PG(2,2), а их бихроматические графы являются подграфами графа инцидентности PG(2,2) (рис.11***а***,***б***). ПК, являющийся объединением осью 2-го порядка двух ПКТ$_{25}$, определяется подтаблицей ТИ конфигурации 9_3 (рис.11***в***).

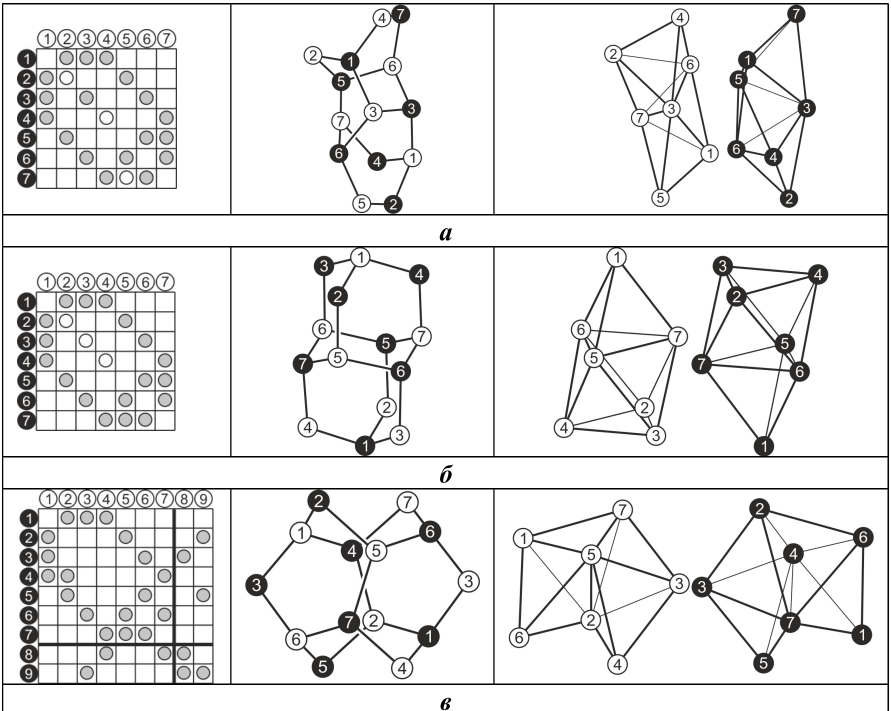
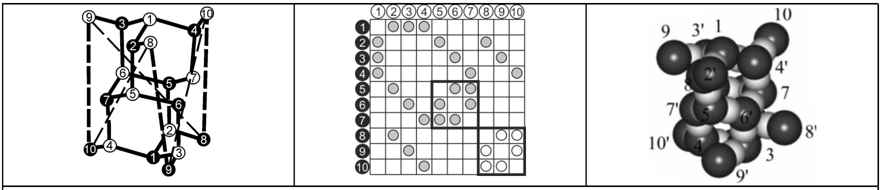
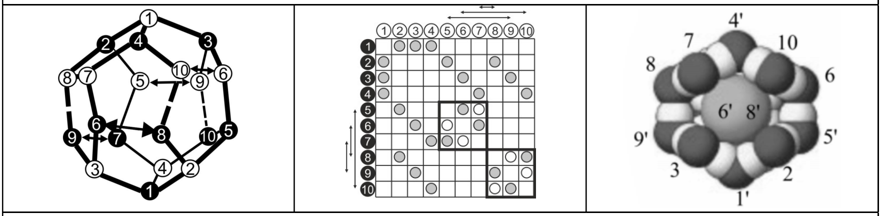


Рис.11 Отбрасывание (показанных пустыми кружками) знаков инцидентности в ТИ PG(2,2) определяет: (***а***) ПК$_{18,18}$, являющийся объединением двух ПКТ$_{18}$ осью 2 порядка; (***б***) параллелоэдр алмаза ПК$_{24,24}$ – объединение двух ПКТ$_{24}$ центром инверсии; (***в***) Выделенная жирными линиями подтаблица 7x7 ТИ конфигурации 9_3 определяет ПК$_{25,25}$, являющийся объединением двух ПКТ$_{25}$ осью 2 порядка.

Показано, что параллелоэдр алмаза ПК$_{24,24}$ генерирует структуру алмаза при объединении таких ПК$_{24,24}$ по параллельным друг другу “граням” (гексациклам в конфигурации кресло). ПК$_{18,18}$ вкладывается в политоп {240} – энантиоморфное алмазоподобное объединение “белого” и “черного” политопов {3,3,5}. Структурным подтверждением ограничения ПК не более чем 20 вершинами является симметрийно-возможная трансформацией 20 вершинного алмазоподобного кластера (рис.12***а***) в додекаэдр (рис.12***б***). Это определяет выделение алмазоподобных структур из всего класса тетракоординированных структур, включающего клатраты, фуллериты и т.п.



а



б

Рис.12. Тетракоординированные 20-вершинные (***а***) ПК$_{1,1}$ алмаза и (***б***) додекаэдр. Определяющие их таблицы инцидентности отличаются лишь стрелками и парами троек двойных кружков, в выделенных квадратах. Ребрам между вершинами одного цвета соответствуют стрелки, связям, которые не являются ребрами, – пустые кружки. Соответствующие кластеры воды (номера черных вершин – числа со штрихами) изображены в ван-дер-ваальсовых очертаниях.

Установлено, что политоп {240} может быть построен из 24-вершинного политопа {3,4,3} по замкнутому алгоритму, который был определен как “замкнутый алгоритм Госсета”:

$$\{240\}=(\text{sn-}\{3,4,3\}\cup\{3,4,3\}^*)\cup(\text{sn-}\{3,4,3\}^*\cup\{3,4,3\})=\{3,3,5\}\cup\chi\{3,3,5\}, \quad (6)$$

где 96 вершинный политоп sn-{3,4,3} возникает при размещении вершин (делящих ребро по золотому сечению) на каждом из 96 ребер политопа {3,4,3}; дуальные (и конгруэнтные) политопы обозначены звездочкой.

Для политопа {240} построено расслоение Хопфа:

$$\{240\} = \text{база }([4^6, 6^8])\cdot\text{слой}\{10\}, \quad (7)$$

где в слое 10 вершин, $[4^6, 6^8]$ – символ 24-вершинного усеченного октаэдра, имеющего 6 квадратных и 8 гексагональных граней. Показано, что реализация (7), как объединения двух расслоений для {3,3,5} (рис.13***а***,***б***), приводит к двум вариантам (рис.13***в***,***д***), которым соответствуют линейные объединения ПК либо без “висячих” вершин, либо без циклов (рис.13***г***,***е***). Такими ПК являются ПК алмазоподобной структуры (ПКА) и ПК углеводородно-подобной структуры (ПКУ). В частности, возможны обладающие осью 2 порядка 14-вершинные $ПКА_{18,18}$ (рис.11***а***) и $ПКУ_{18,18}$. Объединение двух $ПКА_{18,18}$ по общему гексациклу (в конформации “твист-ванна”) генерирует канал (рис.13***г***) в политопе {240}, а объединение двух ПКУ по общей вершине генерирует спираль (рис.13***е***) в политопе {240}. Показано, что и $ПКА_{18,18}$, и $ПКУ_{18,18}$ вкладываются в 26-атомный кластер политопа {240}, определяемый PG(2,3) (рис.14).

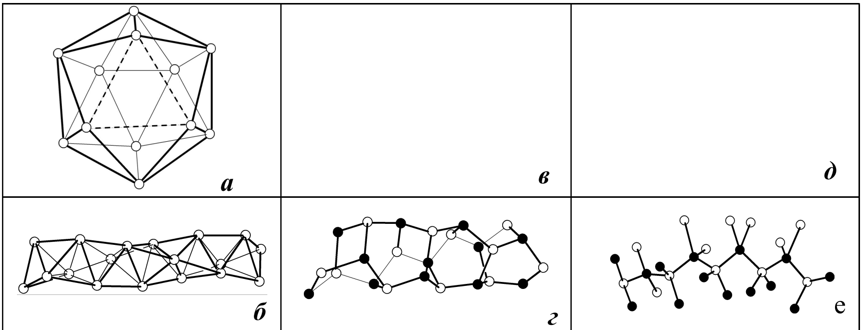
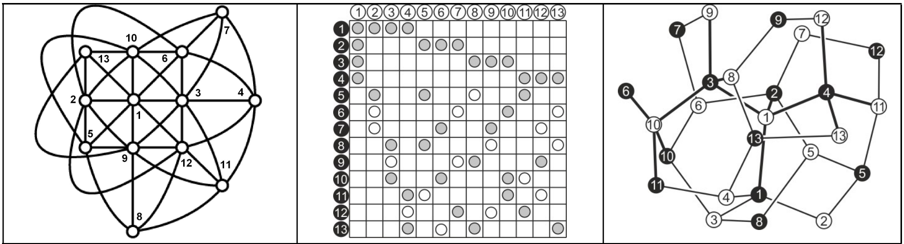


Рис.13. (***а***) Все вершины икосаэдра - базы расслоения Хопфа для политопа {3,3,5}, охватываются четырьмя треугольниками (один из них выделен пунктиром); (***б***) Соответствующее выделенному треугольнику икосаэдра (***а***) объединение в тетраспираль 3-х соседних 10-вершинных цепей в расслоении Хопфа для политопа {3,3,5}; (***в***) Объединение двух (“черного” и “белого”) прямых икосаэдров в усеченный октаэдр - базу расслоения Хопфа для политопа {240}. Объединению в правильный шестиугольник “черного” и “белого” правильных треугольников, показанных пунктиром, соответствует “канал”[6] (***г***) в политопе {240}; (***д***) Объединению “черного” и “белого” равнобедренных треугольников, показанных пунктиром, соответствует линейная “углеводородно-подобная” цепь (***е***) в политопе {240}.

Установлено, что для двух ПКА объединение возможно лишь по общему циклу (рис.13***г***), а для двух ПКУ объединение возможно либо по общей вершине (рис.13***е***), либо по общему ребру одного из двух ПКТ, образующих ПКУ (рис.15). Выбор законов объединения определенного числа “составных” $ПКУ_{18,18}$ или “декорированных” $ПКУ_{18,21}$ позволяет априори определять симметрийно-возможные структуры углеводородных цепей – типичных компонентов молекул фосфолипидов биомембран.



а	***б***	***в***

Рис.14. (***а***) Граф инцидентности PG(2,3); (***б***) Отбрасывание 15 (показанных пустыми кружками) знаков инцидентности в таблице инцидентности PG(2,3) определяет 26-вершинный кластер (***в***) политопа 240, содержащий выделенный жирными линиями составной тетраблок.

Система ПК построена как квадрат Кэли для всех ПКТ из системы ПКТ (табл.2), каждый ПК определяется объединением ПКТ строки и столбца (табл.3) 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-, гептациклы и “висячие” вершины. Графы N-вершинных ПКА и ПКУ при N = 2n определяются n-вершинными (под)конфигурациями конечной проективной геометрии, при N ≠ 2n – пересечениями таких (под)конфигураций.

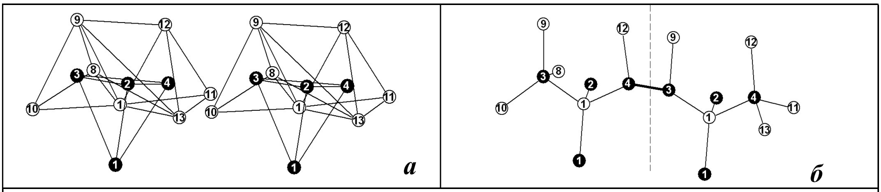


Рис.15. (***а***) “Стыковка” по торцевым ребрам (13–11 и 10–8) двух декорированных тетраблоков определяет двойную связь **4-3** в углеводороднопободной цепи (***б***). Граница между тетраблоками обозначена пунктиром.

В табл.3, представляющей часть системы ПК, помещен лишь символ $ПК_{i,j}$, а на место $ПК_{j,i}$ помещается символ, определяющей его конфигурации $(m_f,\ n_d)$. Для $ПК_{i,i}$, такая информация размещается на пересечении i-го столбца с подтабличной строкой. $ПК_{i,j}$ обозначены символами структур или спиралей, в которых они реализуются, например, ПК$_{18,18}$ ПК$_{24,24}$ и ПК$_{25,25}$ (рис.11) - это кластеры из: канала с симметрией 30/11, алмаза (diamond, обозначение D) и ядра винтовой дислокации в алмазе (D^d).

Таблица 3. Часть системы ПК, представленная в форме “таблицы умножения” ПКТ из таблицы 2.

	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						$\widetilde{10}_3^4$	$\frac{30}{11}$					D_2^R, L_3^R					
19								$\frac{30}{11}-2$				D_2^{+dc}					
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
	$\widetilde{10}_3^4$				7_3		7_3	{3,5}	4_3	$\{4,4\}_{3,1}$	{3,5}	7_3 $(9_3)_2$	$(9_3)_3$	$(9_3)_2$		$(9_3)_1$	10_3

Материалы главы 4 опубликованы в работах [1-5, 11-13, 15, 25, 36, 37].

Пятая глава посвящена вопросам сборки стержней, генерируемых порождающими кластерами, в упорядоченные алмазоподобные структуры. Рассмотрены: структура алмаза и ее однозначное отображение в решетку декорированных полигонов, упорядоченные алмазоподобные структуры (кристаллы, кристаллы с линейными дефектами, межзеренными границами и т.п.), определяемые разбиениями плоскости на декорированные полигоны, группы цветной симметрии разбиений плоскости на декорированные полигоны, отображения упорядоченных алмазоподобных структур в разбиения двумерных поверхностей на декорированные полигоны, детерминированная некристаллическая алмазоподобная структура (ДНАС), определяемая политопом {960}.

Показано, что отображение на плоскость стержня из объединяемых по 5-, 6-, 7-вершинным поперечным циклам ПКА из табл. 3 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 соответствует стыковка таких декорированных полигонов по правилу: каждая вершина принадлежит 4-м полигонам, типы углов при каждой вершине чередуются (пустой, зачерненный, пустой, зачерненный). Примеры подобных отображений приведены на рис.16.

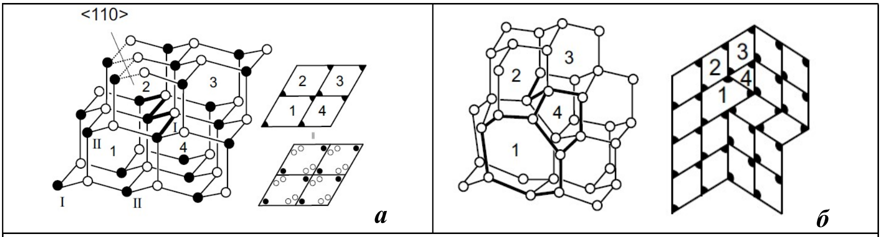


Рис.16. (***а***) Отображение структуры алмаза в решетку декорированных ромбов, узел которой соотвествует <110>-цепочке алмаза. Тип (I или II) этой цепочки (в <110>-канале) определяется зачерненным или пустым углом ромба. Замена зачерненных (незачерненных) углов ромбов черными (белыми) точками приводит к орбите точек группы цветной симметрии Виттке-Гарридо P6mm/Pmm2; (***б***) Отображение краевой дислокации с плоскостью скольжения (100) в алмазе (пента- и гептациклы выделены жирными линиями) в разбиение плоскости на декорированные полигоны

Каждый из декорированных полигонов вкладывается в правильный шестиугольник, поэтому стыковка 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 P6mm гексагональной решетки. Установлено, что все идеальные прототипы упорядоченных некристаллических алмазоподобных структур (дислокаций, межзеренных границ, других линейных дефектов в алмазе, алмазоподобых пленок) могут быть получены определением всех групп цветной симметрии, отображающих симметрию разбиения 2-мерной поверхности на декорированные полигоны. Пример симметрийно-возможного врастания линейного дефекта в структуру алмаза приведен на рис.17.

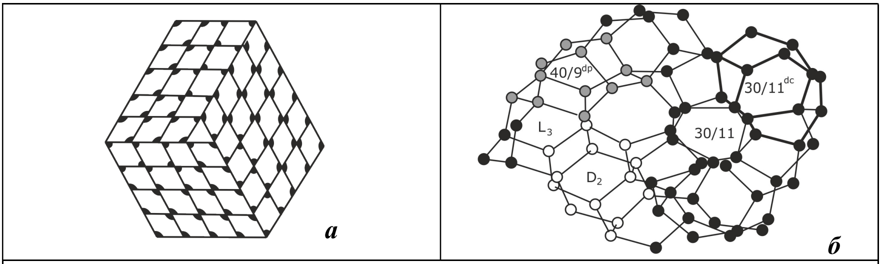


Рис.17. Разбиению плоскости на декорированные полигоны (***а***) соответствует спиральная подструктура вдоль направления <111> в алмазе (***б***). Белые шары принадлежат (скрученному) алмазному ПК D_2 с поперечным гексациклом, серые – ПК $40/9^{dp}$ с поперечным пентациклом; между ними находится (скрученный) лонсдейлитовый ПК L_3. Жирными линиями выделен ПК $30/11^{dc}$ с поперечным гептациклом, в центре - ПК 30/11.

Показано, что при определении слоя в (7) как 20-вершинной цепи, подобной <110> – цепочке алмаза, базой в расслоении Хопфа для политопа {240} является кубооктаэдр. Вторая координационная сфера решетки E_8 позволяет определять алмазоподобные политопы, число вершин в которых кратно 240. Учетверение каждой вершины кубооктаэдра приводит к 48-вершинному разбиению поверхности усеченного куба на «квадраты» и треугольники (рис.18***а***), которое определяет $48 \cdot 20 = 960$-вершинный алмазоподобный политоп {960}. Развертка такого куба вкладывается в ленту из декорированных полигонов (рис.18***б***); сопоставление каждому полигону этой ленты стержня из ПКА одного типа приводит к суперспирали из стержней, генерируемых ПКА с боковыми гексациклами и поперечными пента-, гекса- и гептациклами. Такая суперспираль представляет собой детерминированную некристаллическую алмазоподобную структуру (ДНАС) (рис.18***в***).

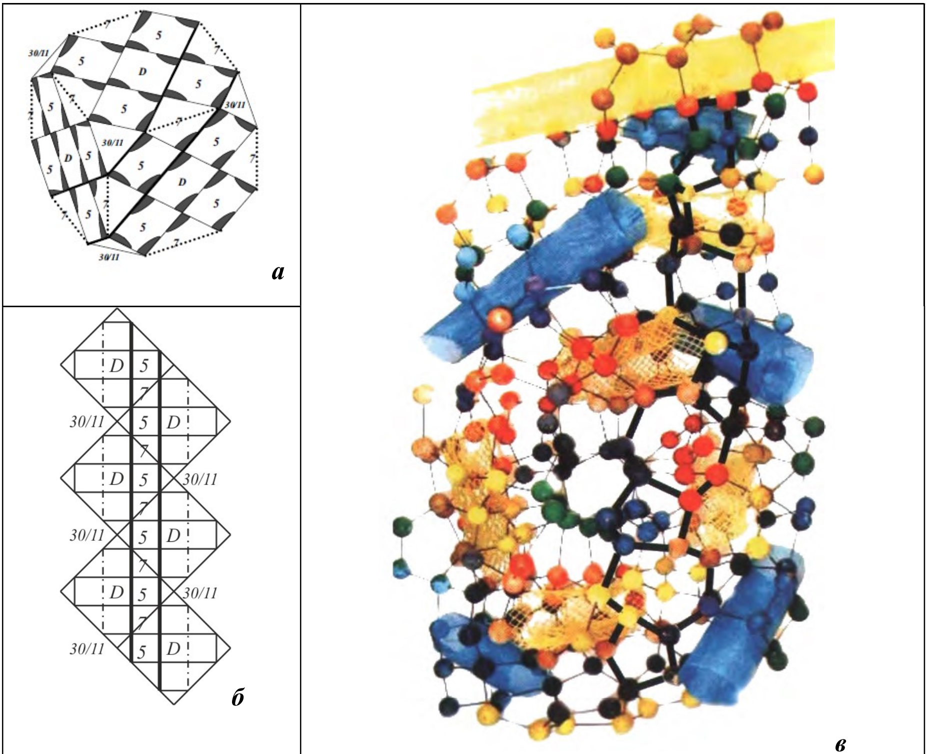


Рис.18. (***а***) Усеченный куб, разбитый на декорированные полигоны; (***б***) Развертка полиэдра (***а***), жирными линиями выделена лента из декорированных полигонов; (***в***) Модель детерминированной некристаллической алмазоподобной структуры – спираль из стержней, образованная изолированными друг от друга скрученными алмазными каналами (синие трубки) и каналами 30/11 (желтыми трубками). В канал, почти перпендикулярный вертикальной оси модели, синяя трубка не вставлена. Жирными линиями показано объединение каналов с «поперечными» пента- и гептациклами, которые возникают в промежутках между синими и желтыми трубками и соответствуют 5- и 7-вершинникам центральной полоски на рис.***б***.

Материалы главы 5 опубликованы в работах [1, 2, 10, 15, 42, 45, 47].

В **шестой** главе предложена трехуровневая (полиэдры-полости, стержни, объединения стержней) модель строения тетракоординированной структуры газогидрата. Полиэдры – полости газогидратов и симметрийно возможные фазовые переходы рассмотрены в связи с конструкциями алгебраической геометрии, группами PSL(2,11), Матье. Определены таблица инцидентности графа полиэдра Кельвина, замкнутый набор простых 24-вершинных, 14-гранных полиэдров, эквивалентных полиэдру Кельвина по группе Матье M_{12}, простой 24-вершинный 14-гранный полиэдр, не являющийся стереоэдром, закономерности полиэдральной сборки упорядоченной тетракоординированной структуры газогидрата, линейные подструктуры газогидратов с некристаллографической симметрией, упорядоченные структуры клатратов (газогидратов) как объединения геликоидов с нецелочисленными винтовыми осями, модель фазового перехода газогидрат I – лед.

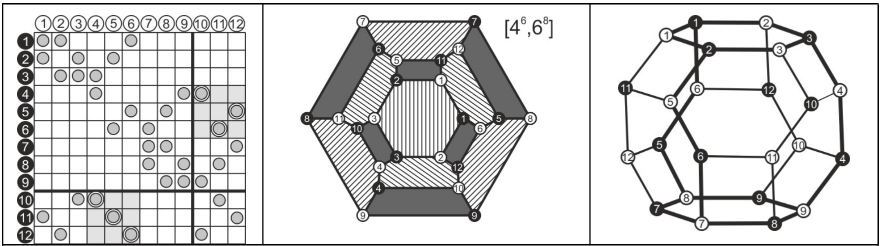
Показано, что расширение ТИ конфигурации 12_3 (табл.1) снятием запрета проективной геометрии на образование прямоугольников из знаков инцидентности, определяет таблицу инцидентности 12x12 параллелоэдра Кельвина-Федорова ($ТИ_{КФ}$), 24 вершины которого принадлежат двум (условно, “белому” и “черному”) прямым икосаэдрам (рис.19***а***). Установлено, что наличие в группе Матье M_{12} подгрупп $M_n{\cdot}S_{12-n}$, $n = 8, 9, 10, 11$, где S_{12-n} симметрическая группа, определяет возможность существования диагональных блоков $n \times n$ и $(12-n) \times (12-n)$ в таблицах инцидентности $ТИ_f$, симметрийно-эквивалентных $ТИ_{КФ}$ по группе M_{12}. Строение $ТИ_f$ простых 14-гранников с 4, 5 и 6-угольными гранями (статистическим разбиением на которые аппроксимируется плотнейшая нерешетчатая упаковка шаров) определяется соотношением:

$$2\,[3+(3-k_i^j(f))]\cup\{(3(7+f)\cup 3(1+|f|)\}+\delta\,(k,f) = 36, \quad f = 0, \pm 1, \qquad (8)$$

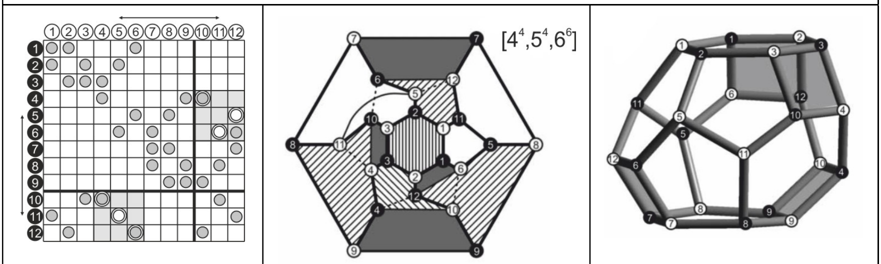
где в квадратной и фигурной скобках указано число знаков инцидентности в недиагональном и диагональных блоках; $\delta(k,f)=2k_i^j(f)-3(f+|f|)$ – число “монохроматических” стрелок, соответствующих ребрам между вершинами одного цвета. При $f = 0$, $k_i^j(0) = 0$, $\delta = 0$ соотношение (8) определяет $ТИ_{КФ}$ бихроматического графа параллелоэдра $[4^6,6^8]$. 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:

$$[4^6,6^8]\cong[(4\cup 6)^{6-2k},(4\cup 6)^{2k},6^2] \leftrightarrow [((4\cup 6)^2)^{3-k},((5^2)^2)^k, 6^2]\cong[4^{6-2k}, 5^{4k}, 6^{8-2k}], \quad (9)$$

где $(4\cup 6)^2$ и $(5^2)^2$ – декациклы, возникающие при объединении пары боковых 8-угольников или двух пар 5-угольников.При k=1 (9) определяет полиэдр (рис.19***б***). Вывод всех $ТИ_f$, по (8)-(9) приводит к определению набора из 10 простых 24-вершинных 14-гранных стереоэдров с 4-, 5- и 6-угольными гранями, существование которого подтверждено[37].



а



б

Рис.19. (***а***) ТИ определяет диаграмму Шлегеля полиэдра Кельвина $[4^6, 6^8]$, представленного как объединение черного и белого прямых икосаэдров; (***б***) ТИ определяет диаграмму Шлегеля стереоэдра $[4^4, 5^4, 6^6]$ федоровских групп $P4_2/mbc$, $Pnma$. Жирные линии выделяют в ТИ блоки 9x9 и 10-12x10-12. ТИ отличаются друг от друга только светло-серыми квадратами. На диаграммах Шлегеля 4-угольники закрашены темно-серым, гексагоны базы и боковые гексагоны – вертикальной и косой штриховкой.

Строение газогидратов предложено свести к трехуровневой схеме: полиэдры-полости, стержни из полиэдров-полостей, объединение стержней, а структуры каждого уровня рассматривать как евклидовы реализации конструкций комбинаторной (алгебраической) геометрии.

Показано, что стержни из 2L-вершинных простых полиэдров, $L = 10, 12$, характеризуются трехкоординированным бихроматическим графом с ТИ размером $L\times L$ и подтаблицей ТИ$_p$ 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, $r = 1, 2\ldots$. Расширения ТИ$_p$ до ТИ$_f$, $f = 1, 2, \ldots$ размером $L\times L$ задают графы 2L-вершинных полиэдров (кластеров), содержащие изоморфные $2p^r$ –вершинные подграфы. Возможность взаимных трансформаций стержней из таких простых полиэдров определяется условием: $C_{L/\mu}\subset G((p^r)_3)$, $\mu = 1, 2\ldots$, где C_L – циклическая группа порядка L.

Предложена модель фазового превращения газогидрат I – гексагональный (обычный) лед, которое рассматривается как результат трансформации стержней из 24-вершинных 14-гранных тетракадекаэдров (с локальной винтовой осью 12-го порядка) (рис.20***а***) в стержни из параллелоэдров Кельвина-Федорова (рис.20***б***) с трансформацией последних в стержни из 24-вершинных кластеров льда (рис.20***в***). 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 $G(9_3)$ конфигурации (9_3) порядка 216 (табл.1). Молекула-гость выходит через “боковой” декацикл этого 2·9-вершинного подграфа, что приводит к “схлопыванию” параллелоэдра Кельвина-Федорова в равновершинный кластер льда. Группа $G(9_3)$ содержит подгруппу C_6, поэтому обусловленность трансформации стержня трансформациями образующих его полиэдров является симметрийно-допустимой и позволяет априори определять необходимые (симметрийные) условия образования и разложения газогидратов.

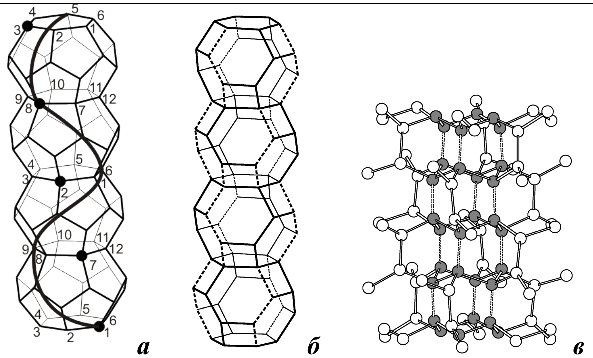


Рис.20. Стержни из 24-вершинных тетракадекаэдров, усеченных октаэдров и тетракоординированых кластеров, принадлежащие кристаллам газогидрата I (***а***), содалита (***б***) и льда (***в***). В стержне из тетракадекаэдров жирной линией показан геликоид Госсета 12/5, зачерненные вершины 1-7-2-8-3 принадлежат геликоиду $12/1=12_6$. Пунктиром показаны ребра, отбрасывание которых предшествует взаимной трансформации стержней. В стержне льда серыми шарами показаны гексациклы (кресла), расположенные вдоль направления [0001].

Материалы главы **6** опубликованы в работах [16, 17, 29, 36, 40, 41, 43].

В **седьмой** главе закономерности строения ряда спиральных биополимеров предложено рассматривать как структурные представления системы конструкций топологии и алгебраической (комбинаторной) геометрии, основное внимание уделено примеру α-спирали. Спираль с винтовой оси 40/11 из тетраблоков рассматривается как математическая модель (идеальный прототип) α-спирали, определяющая (с точностью до 2%) ее экспериментально установленные структурные параметры. Математические модели пептидной плоскости α–спирали и объединения α-спиралей в глобулярных белках сопоставлены с экспериментальными данными.

Показано, что для спиральных биополимеров условия сборки атомов (молекул) в соответствии с топологическими свойствами E^3 могут определяться единственной минимальной поверхностью M_0 - общей для геликоида и катеноида, обладающей нулевым индексом неустойчивости[38]. Поверхность M_0 позволяет перейти к топологически устойчивой спирали, в которой отношение шага спирали $H_{кр}$ к радиусу R задается единственным положительным решением уравнения:

$$\mathrm{cth}(H_{кр}/2R) = (H_{кр}/2R) = \pi/\tau^2 = k \approx 1.2 \text{ (более точно } 1.1996786\ldots), \quad (10)$$

связывающего 2 константы: π и золотое сечение $\tau = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1.618$. Отношение $H_{кр}/2\pi R=\mathrm{tg}\,\theta_{кр} \approx 0.38187 \approx 1/\tau^2$ определяет шаговый угол спирали равный $\theta_{кр.} \approx 20{,}906^0$ - угол между двойной и тройной осью икосаэдра. В дискретном варианте спираль должна обладать осью m/p, где m – целое, p – целая часть $\exp(2\pi/\tau^2)$, m/p - периодическая десятичная дробь.

Установлено, что существует триангулированная поверхность, соответствующая M_0 и определяющая прямоугольник, в котором 40 объединений десяти равнобедренных (близких к правильным, т.к. угол при вершине равен 56.4^0) треугольников равномерно распределены по 11 виткам (рис.21***а***). Каждое из таких объединений представляет собой развертку линейного тетраблока, в котором среднее отклонение ребер от ребер правильного тетраэдра составляет ~2% (рис.21***б***). Склейка каждой развертки в тетраблок (рис.21***г***) определяет спираль с винтовой осью 40/11 из 40 объединяемых по грани тетраблоков и соотношением шага спирали к радиусу равным $2\pi/\tau^2$(рис.21***а***,***д***). Данная спираль из тетраблоков топологически совпадает со спиралью из 15 тетраблоков (рис.8***в***), обвивающей в политопе {3,3,5} замкнутую в тор тетраспираль (рис.5***а***).Показано, что эта спираль определяет параметры идеальной математической при сопоставлении атому C_α (реальной α–спирали) общей вершины тетраэдров, составляющих тетраблок. Такую "тетраблочную спираль" (с искажениями ребер ~2%) можно рассматривать как α_0–спираль - приближение идеального высокосимметричного образца α-спирали с осью 40/11. Именно теоретическая винтовая ось 40/11 (т.е. 3.(63) ост/виток) является тем экспериментально установленным[39], но не определенным эталоном для возможных осей α-спиралей, входящих в суперспирали из α-спиралей.

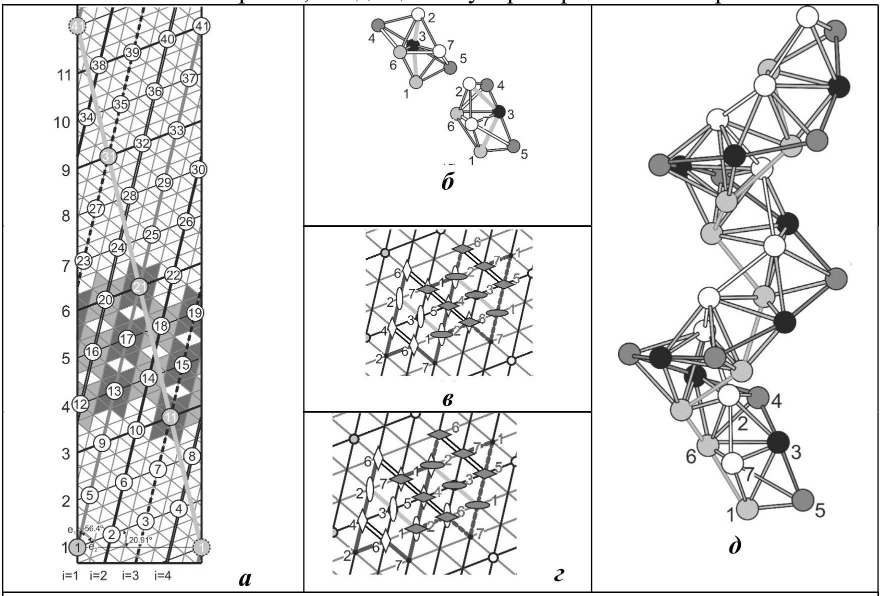


Рис.21. (***а***) Развертка триангулированной цилиндрической поверхности, содержащая спираль 40/11 – равномерное распределение 40 вершин по 11 виткам. Вершины i и i + 4 принадлежат одной из четырех i-прямых, i = 1, 2, 3, 4. Пересечения витков с толстой серой (диагональной) прямой делит спираль на четыре 11-вершинных части, имеющих по одной общей вершине. Векторы e_1 и e_2 - единичны, длина вектора разности e_1 - e_2 равна 0.93; (***б***) Два тетраблока, развертки которых вкладываются в развертку (***д***), объединяются по общей грани. В каждом тетраблоке цепочки белых и серых ребер длины 0.93 образуют спирали типа 15/4. Остальные ребра - единичной длины; (***в***) Развертка объединения по грани двух тетраблоков, сохраняющего тип цепочки 15/4 и генерирующего тетраспираль (рис.5). Пересечение однородно: ромб-ромб и овал-овал; **(*г*)** Развертка объединения по грани двух тетраблоков, генерирующего спираль ***а)*** и меняющего тип цепочки 15/4. Пересечение необнородно: ромб-ромб и ромб-овал. Номера вершин на рис.***б-г*** совпадают; (***д***) Спиральное объединение по грани тетраблоков, центры которых (вершины типа 3) показаны черным. Белые, черные, серые и светло-серые шары принадлежат спиралям 40/11. Одинаковые вершины на всех рисунках показаны одинаковым цветом.

Параметры α_0–спирали и экспериментальные параметры α–спирали, соответственно: отношение шага спирали к радиусу 2.4 и 2.35, шаговый угол 20.9^0 и 20.5^0, расстояние $C_\alpha - C_\alpha$ 3.81 Å и 3.80 Å; ось 40/11 (вращение на 99^0) и 36/10 (вращение на 100^0); радиусы 2.3 Å и 2.3 Å. Соотношение $i \to i+4$, определяющее расположение водородных связей в α-спирали, - это реализация соотношения $(40/11)^4 = 10_1$. Экспериментально наблюдаемая средняя длина α-спирали из 11 остатков определяется соотношением $(40/11)^{10} = 4_1$, задающим разбиение 40 вершин на четыре 11-вершинных цикла, пересекающихся по общим вершинам.

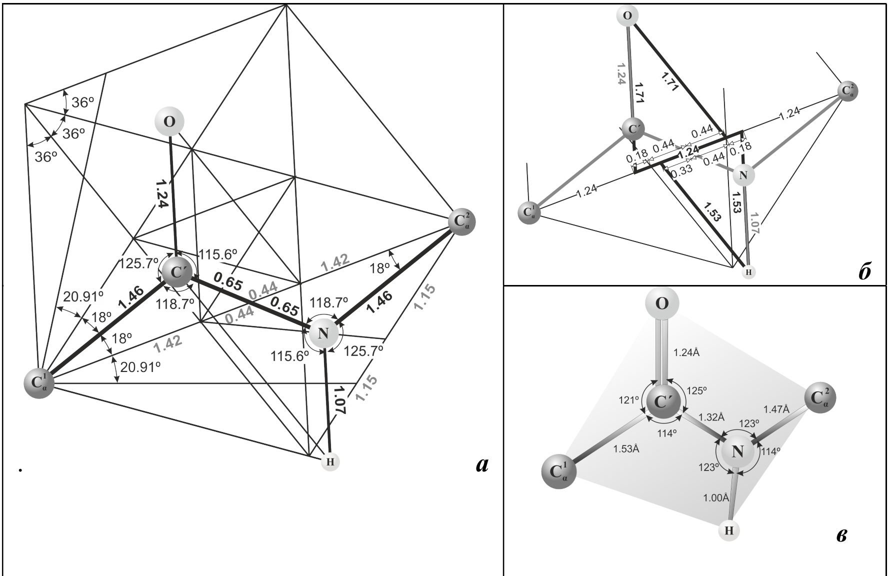


Рис.22. (***а***) Размещение атомов пептидной плоскости α-спирали в особых точках экваториальной плоскости плоского тетраблока. Длины соединяющих атомы ребер указаны в ангстремах. Ребра C^1_α – C', C' – N и N – C^2_α симметричны относительно середины диагонали пентагона, C' и N- расположены в центрах тяжести золотых треугольников со сторонами 2.3;
(***б***) Размещение атома O в вершине «золотого треугольника с серебряным основанием», равным $1.06=2.3\ \tau^{-2}\ (1+\sqrt{2})$. 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.

Установлено, что 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 (рис.22).

Показано, что оптимальное покрытие сферы парами кругов максимального углового радиуса[40] определяет возможную упаковку одинаково длинных α-спиралей в глобулярном α-белке, который аппроксимируется сферой[41] (рис.23).

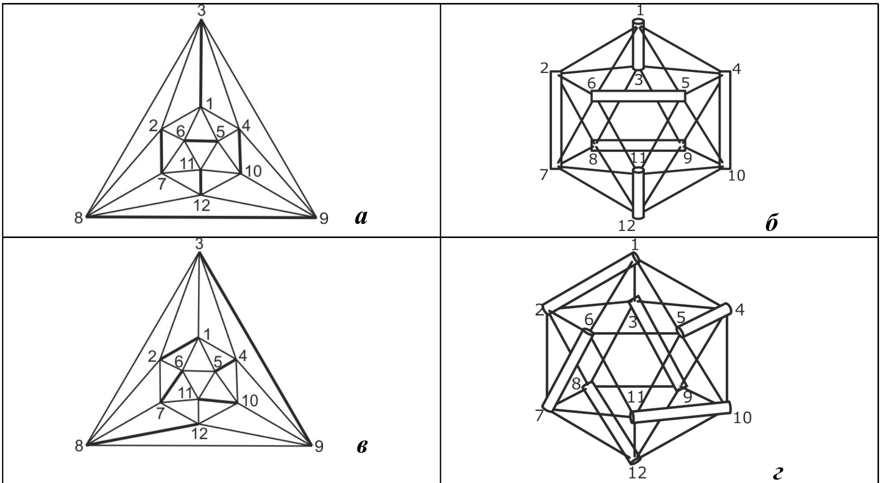


Рис.23. (***а***), (***в***) Диаграммы Шлегеля икосаэдра, на которых жирными линиями выделены системы 6 ребер, охватывающих все вершины. Концы каждого такого ребра – центры кругов максимального углового радиуса, образующихся при пересечении парой шаров сферы[40]; (***б***), (***г***) Совпадающие с (***а***), (***в***) размещения цилиндров по ребрам икосаэдра. Варианты (***б***), (***г***) определяют объединение α-спиралей в суперспирали фибриллярных белков[41].

Установлено, что решётка E_8 определяет винтовые оси 10/3 = 3,(3); 30/13 = 2,(307692), 30/7 = 4,(285714), соответствующие (с точностью до 2%) числу остатков на виток в базовых спиральных биологических структурах: спирали коллагена, скрученной β-структуре, π-спирали.

Материалы главы **7** опубликованы в работах [44, 45, 47, 54, 60].

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–спирали), 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 ПК 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 политопа {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 соответствует стыковка 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, алмазоподобых 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) приводит 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 полиэдров-полостей, объединение стержней. Симметрии конфигурации 12_3 конечной проективной геометрии позволяют *априори* определять графы всех 10 простых 24-вершинных 14-гранных стереоэдров (полиэдров-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 полиэдров-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.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Главы в книгах:

[1]. **Талис А. Л.** Обобщенная кристаллография алмазоподобных структур // В кн.: Синтез минералов. Александров: ВНИИСИМС. 2000. Т. 3. С. 321-415.
[2]. **Талис А. Л.** Симметрия тетракоординированных и тетраэдрических структур в рамках алгебраической геометрии // В кн.: А.В. Шубников, В.А. Копцик. Симметрия в науке и искусстве. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2004. С.419-488.
[3]. Самойлович М. И., **Талис А. Л.** Теория симметрии наноструктурных состояний конденсированных сред как структурная реализация конструкций алгебраической геометрии // В кн.: “Высокие технологии в промышленности России”, коллективная моно-

графия под ред. М. И. Самойловича, А. Ф. Белянина. М.: ЦНИТИ “Техномаш”, 2004. 415 с. Глава 2 (С.121-257).
[4]. 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 (С.5-239).
[5]. 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.
[6]. Крапошин В. С., **Талис А. Л.** Симметрийно-структурные закономерности сопряжения различных упорядоченных структур в единный комплекс // в кн.: Зайцев А.И., Крапошин В.С., Родионова И.Г., Семернин Г.В., Талис А.Л. Комплексные неметаллические включения и свойства стали. М.: Металлургиздат. 2015. 276 с. Глава 3 (С. 101-180).
[7]. 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: “Издательство УМЦ УПИ”, 2017. 380с. Глава 2 (С.42-79).

Статьи в рецензируемых научных журналах:

[8]. 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.
[9]. 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.
[10]. 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.
[11]. **Талис А. Л.** Обобщенная кристаллография алмазопободных структур. I. Конечные проективные плоскости и определяемые ими особые кластеры алмазоподобных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. №. 4. С.583–593.
[12]. **Талис А. Л.** Обобщенная кристаллография алмазопободных структур. II. Алмазная упаковка в пространстве трехмерной сферы, подконфигурации конечных проективных плоскостей и порождающие кластеры алмазопободных структур // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 5. С.775–784.
[13]. **Талис А. Л.** Кластеры алмазоподобных структур как евклидовы реализации конструкций проективной геометрии // Доклады Академии наук. 2002. Т. 382. №1. С.20-23.
[14]. Kraposhin 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.
[15]. 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.
[16]. **Талис А. Л.** Закономерности строения газогидратов и конструкции, определяемые 8-мерной решеткой E_8 // Доклады Академии наук. 2003. Т. 390. №2. С. 172-177.

[17]. **Талис А. Л.** Структурные закономерности строения газогидратов в рамках обобщенной кристаллографии // Кристаллография. 2003. Т. 48, № 3. С. 391-394.

[18]. Kraposhin 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.

[19]. 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.

[20]. 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.

[21]. 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.

[22]. 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.

[23]. 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.

[24]. 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.

[25]. 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.

[26]. Kraposhin 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.

[27]. 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.

[28]. 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.

[29]. **Талис А. Л.**, Беляев О. А., Ронова И. А., Реу А. А., Терещенко Г. Ф. Газогидраты и тетракоординированные структуры, определяемые конструкциями алгебраической геометрии // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 2. С. 199-203.

[30]. Самойлович М. И., **Талис А. Л.** Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решетка E_8 и определяемые ею кристаллогрфические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 4. С. 602-609.

[31]. Крапошин В. С., **Талис А. Л.**, Ван Тхуан Нгуен. Структура ω-фазы как конструкция проективной геометрии и промежуточная конфигурация при полиморфных превращениях в титане и цирконии // Материаловедение. 2007. №8. С. 2-9.

[32]. Kraposhin 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.
[33]. 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.
[34]. Самойлович М. И., **Талис А. Л.** Алгебраические политопы и симметрийные закономерности строения упорядоченных структур // Доклады Академии наук. 2008. Т.420. № 4. С. 472-477.
[35]. 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.
[36]. **Талис А. Л.**, Беляев О. А., Рей А. А., Талис Р. А. К вопросу о симметрийной классификации упорядоченных тетракоординированных структур // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 3. С. 391-396.
[37]. Kraposhin V. S., **Talis A. L.**, Kosushkin V. G., Ogneva A. A., Zinober 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.
[38]. Kraposhin 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.
[39]. Kraposhin 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.
[40]. 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.
[41]. 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.
[42]. 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.
[43]. 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.
[44]. Самойлович М. И., **Талис А. Л.** Структурные закономерности геликоидальноподобных биополимеров в рамках алгебраической топологии. I. особый класс устойчивых линейных структур, определяемых последовательностью алгебраических политопов // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 4. С. 521-529.
[45]. 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.
[46]. Kraposhin 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.
[47]. 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.
[48]. **Talis A. L.**, Kraposhin 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.
[49]. 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.
[50]. Kondrat'ev S. Yu, Kraposhin 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.
[51]. Kraposhin 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.
[52]. 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.
[53]. Крапошин В. С., **Талис А. Л.** Симметрийные основы полимерной модели плотноупакованных металлических жидкостей и стекол // Расплавы. 2016. № 2. С.85-98.
[54]. Samoylovich M. I., **Talis A. L.** Symmetrical-geometry constructions defining helicoidal biostructures. The case of alpha- helix // ArXiv: 1606.01237 [physics.bio-ph].
[55]. 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.
[56]. 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.
[57]. **Talis A. L.**, Kraposhin 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.
[58]. 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.
[59]. Крапошин В. С., **Талис А. Л.**, Каменская Н. И., Арестов В., Зайцев А. И. Размещение коллективных атомов B_{12} в кристаллической структуре γ-Fe и влияние бора на прокаливаемость стали // Металловедение и термическая обработка металлов. 2018. № 2. С.5-13.
[60]. **Талис А. Л.**, Рабинович А. Л. Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров // Кристаллография. 2019. Т.64. № 3. С.341-350.
[61]. Крапошин В. С., Колобнев Н. И., Рябова Е. Н., Эверстов А. А., **Талис А. Л.** Неодно-

родные твердые растворы в сплавах системы Al–Cu–Li: возможное строение кластеров // Металловедение и термическая обработка металлов. 2019. № 2. с.3-12.
[62]. Kraposhin 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.
[63]. Kraposhin 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.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

[1]Friedrichs O. D., Dress A.W. M., Huson D. H., Klinowski J., Mackay A. L. // Nature. 1999. V. 400. P. 644-647.
[2]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).
[3]Danzer L., Papadopolos Z., Talis A. // Int. J. Mod. Phys. B. 1993. V.7. №6-7. P.1379-1386.
[4]Ле Ты Куок Тханг, Пиунихин С. А., Садов В. А. // Успехи мат. наук. 1993. Т.48. №1. С.41-102.
[5]Sadoc J. F., Rivier N. // Eur. Phys. J. B. 1999. V.12. P.309-318.
[6]Mosseri R., DiVincenzo D.P., Sadoc J.F., Brodsky M.H. // Phys. Rev. B: 1985. V.32. No.6. P.3974-4000.
[7]Sadoc J. F., Rivier N. // Philos. Magazine. B. 1987. V.55. №5. P.537-573.
[8]Lidin S., Fredrickson D. // Symmetry. 2012. V.4. P.537-544.
[9]Nelson D. R. // Phys. Rev. B. 1983. V.28. №10. P.5515-5535.
[10]Dmitrienko V. E., Kléman M., Mauri F. // Phys. Rev. B. 1999. V.60. №13. P.9383-9389.
[11]Dmitrienko V. E., Kléman M. // Cryst. Reports. 2001. V.46. №4. P.527–533.
[12]Kleman M. // Adv. Physics. 1989. V.38. №6. P.605-667.
[13]Галиулин Р. В. // Материаловедение. 1999. №6. С.2-5.
[14]Руднев С. В. // 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; 2; 3. М.: Изд-во Эдиториал УРСС. 1998. 336 с.; 1998. 277 с.; 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. // В кн.: XVI научные чтения им. академика Н.В. Белова, 1997. С.79-81.
[18]Картеси Ф. Введение в конечные геометрии. М.: Наука. 1980. 320 с.
[19]Коксетер Г. С. М., Мозер У. О. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. М: Наука. 1980. 240с.
[20]Коксетер Г. С. М. Введение в геометрию. М.: Наука. 1966. 648 с.
[21]Coxeter H. S. M. Regular Polytopes. N.Y.: Dover, 1973. 321 p.

[22]Manton N. S. // Commun. Math. Phys. 1987. V.113. P.341-351.
[23]Sadoc J. F., Mosseri R. // J. Non-Cryst. Solids. 1993. V.153-154. P.247-252.
[24]Щербак О. П. // Успехи мат. наук. 1988. Т.43. №3. С.125-160.
[25]Moody R. V., Patera J. Chen L. Non-crystallographic root systems. Fields institute monographs. 1998. V.10. P.135-178.
[26]Рингель Г. Теорема о раскраске карт. М.: Мир. 1977. 256 с.
[27]Хамфри Дж. Линейные алгебраические группы. М.: Наука, 1980. 400 с.
[28]Делоне Б. Н., Долбилин Н. П., Штогрин М. И., Галиулин Р. В. // Докл. АН СССР. Сер. Мат. 1976. Т.227. №1. С.19-21.
[29]Фоменко А. Т. Дифференциальная геометрия и топология. Дополнительные главы. Ижевск: Ижевская респ. тип.. 1999. 252 с.
[30]Coxeter H. S. M. // Bull. Am. Math. Soc. 1950. V.56. P.413-455.
[31]White A. T. // Proc. London Math. Soc. 1995. V.s3-70. No.1. P.33-55.
[32]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.
[33]Shioda T. // Comment. Math. Univers. Sancti Pauli. 1993. V.42. No.1. P.61-79.
[34]Singerman D. // Bull. London Math. Soc. 1986. V.18. P.364-370.
[35]Szilassi L. // 3rd Int. Conf. APLIMAT-2004. Plenary Lecture. Department of Mathematics, Faculty of Mechanical Engineering, Slovak University of Technology in Bratislava, 2004. P.173-189.
[36]Lavrenchenko S. A. // J. Math. Sci. 1990. V.51. №5. P.2537–2543.
[37]Delgado-Friedrichs O., O'Keeffe M. // Acta Cryst. A. 2005. V.61. No.3. P.358-362.
[38]Тужилин А. А., Фоменко А. Т. Элементы геометрии и топологии минимальных поверхностей. М.: Наука, 1991. 175 с.
[39]Hartmann M., Mendler C., Bassler J., Karamichali I., Ridderbusch O., Lupas A., Alvarez B.// eLife. 2016. V.5. P.11861-11884.
[40]Tarnai T., Fowler P. // Proc. Royal Society. A. 2006. V.462. P.3733–3747.
[41]Murzin A. G., Finkelstein A. V. // J. Mol. Biol. 1988. V.204. P.749-769.