

**ОБОБЩЕННАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ АЛМАЗОПОДОБНЫХ СТРУКТУР.  
II. СИСТЕМА ПОРОЖДАЮЩИХ КЛАСТЕРОВ КАК СИММЕТРИЙНАЯ  
ОСНОВА АПРИОРНОГО ВЫВОДА АЛМАЗОПОДОБНЫХ СТРУКТУР****А.Л. Талис***ВНИИ синтеза минерального сырья, г. Александров*

Рассмотрена 240-вершинная энантиоморфная «алмазная» структура в пространстве 3-мерной сферы  $S^3$ , определяемая реализующимся лишь в  $S^3$  разбиением на правильные тетраэдры. Незначительно искаженные особые (высоко-симметричные) кластеры этой структуры являются кластерами детерминированных алмазоподобных структур (АС) и определяются подконфигурациями конечных проективных плоскостей  $PG(2,q)$ . Симметрично-возможная АС собирается из определенного набора порождающих кластеров (ПК), определяемых как невыпуклые полиэдры, вершины которых являются вершинами нерегулярных составных (бинарных) полиэдров, а графы комбинаторно-топологически эквивалентны графам инцидентности подконфигураций конечных проективных плоскостей  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3,4$ . Показано, что ПК образуют систему, которая однозначно определяется уникальными конструкциями алгебраической геометрии. В качестве примера рассмотрена модель максимально детерминированной некристаллической алмазоподобной структуры.

**ВВЕДЕНИЕ**

В [1] было показано, что адекватное отображение симметрии детерминированных (кристаллических и некристаллических) алмазоподобных структур требует замены евклидова базиса структурной кристаллографии более общим базисом алгебраической (проективной) геометрии. В частности, графы инцидентности особых подконфигураций конечных проективных плоскостей  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3$  оказались комбинаторно-топологически эквивалентны графам особых кластеров алмазоподобных структур (АС). Эти графы отображаются на себя группами проективной геометрии, которые содержат ортогональные группы классической кристаллографии в качестве подгрупп.

Наиболее симметричной АС является такое объединение двух 3-мерных решеток, которое в 3-мерном евклидовом пространстве  $E^3$  реализуется как алмаз, а в пространстве 3-мерной сферы  $S^3$  — как «энантиоморфный алмаз» или политопа {240} [2-4]. Это определяет значение для обобщенной кристаллографии алмазоподобных структур (ОКАС) особых кластеров политопа {240}, которые определяют подконфигурациями  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3$  и рассматриваются в данной работе.

Частые и подробные ссылки на [1] обеспечивают возможность использования введенных в этой работе определений и полученных результатов. Так же как и в [1], для наглядности изложения математической строгостью во многих местах пришлось пожертвовать и использовать иллюстрации, обеспечивающие прямое сопоставление математических конструкций с кластерами, которые они определяют. Полученные результаты являются основой для построения системы ПК, которая позволяет априори выводить симметрично-возможные АС и определять структурные фазовые переходы между ними.

**1. Энантиоморфная 240-вершинная «алмазная» структура в пространстве 3-мерной сферы  $S^3$  – нерегулярный политоп {240}**

Образно говоря, за счет отказа от метрических соотношений 3-мерные платоновы тела обобщаются до «проективных правильных полигонов» – конечных проективных плоскостей  $PG(2,q)$  [2]. Если же не игнорировать метрические соотношения, то обобщение платоновых тел требует увеличения размерности пространства от  $E^3$  до  $E^n$ ,  $n > 3$ . При этом платоновы тела, обозначаемые в символике Шлефли  $\{p, q\}$  (рис. 1а), могут быть обобщены до 4-мерных платоновых тел – политопов  $\{p, q, r\}$ , составленных из ячеек  $\{p, q\}$  таким образом, что каждая грань  $\{p\}$  принадлежит двум ячейкам, а каждое ребро –  $r$  ячейкам. Расположение ячеек при вершине  $\{p,q,r\}$  соответствует расположению граней полиэдра  $\{q,r\}$  – вершинной фигуры политопа [3-6].

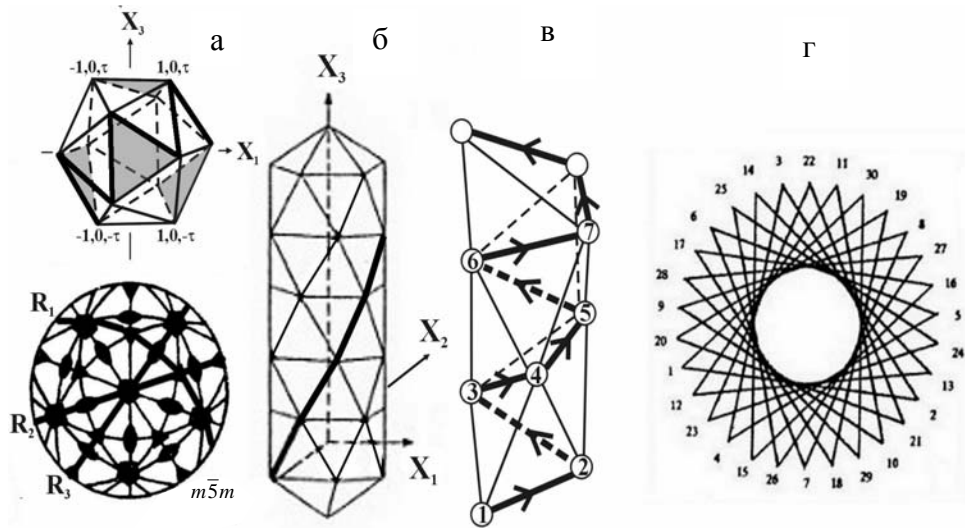


Рис. 1. Отображение в  $E^3$  подструктур политопа  $\{3,3,5\}$  [4, 6].

а — Икосаэдр и стереографическая проекция группы  $m\bar{5}m$ , фундаментальную область которой выделяют плоскости отражения  $R_1, R_2, R_3$ , показанные жирными линиями. Центры 4 выделенных в икосаэдре тетраэдров образуют тетраэдр; часть 10-реберного многоугольника Петри икосаэдра  $\{3,5\}$  показана жирными линиями.

б — Стержень из икосаэдров с общей пятерной осью. Часть спирали, определяемой винтовой осью  $10_1$  политопа  $\{3,3,5\}$ , показана жирной линией.

в — Цепочка Бернала из тетраэдров, иррациональная винтовая спираль  $30/11$ , соответствующая многоугольнику Петри политопа  $\{3,3,5\}$ , показана жирными стрелками.

г — Звездчатый полигон, возникающий при ортогональной проекции 30 вершин политопа  $\{3,3,5\}$  вдоль оси  $30/11$

Если бы было возможно разбиение  $E^3$  на правильные тетраэдры, то различные тетракоординированные структуры (в том числе и АС) можно было бы рассматривать как результат заселения центров тетраэдров по различным законам. Двугранный угол правильного тетраэдра  $70.53^\circ < 72^\circ = 360^\circ/5$ , поэтому такое разбиение  $E^3$  не реализуется. В  $E^3$  угловой дефицит объединенных тетраэдров ликвидируется за 100

счет отказа от их правильности, например, объединение 20 тетраэдров в икосаэдр (рис. 1а) возможно лишь при наличии в тетраэдрах ребер двух типов с отношением длин  $\approx 0.951$ . При этом 12 вершин икосаэдра  $\{3,5\}$  осуществляют регулярную триангуляцию сферы  $S^2$ , которая отображается на себя ортогональной группой  $m\bar{5}m$  (или группой отражений  $[3,5]$ ) порядка 120, задаваемой кодом:

$$R_i^2 = (R_1 R_2)^3 = (R_2 R_3)^5 = (R_1 R_3)^2 = (R_1 R_2 R_3)^{10} = 1, \quad (1)$$

где  $R_i, i = 1, 2, 3$  — порождающие плоскости отражения, выделяющие фундаментальную область группы  $m\bar{5}m$ ;  $R_1 R_2 = 3, R_2 R_3 = 5, R_1 R_3 = 2$  — вращения на  $2\pi/3, 2\pi/5$  и  $\pi$ ;  $R_1 R_2 R_3 = \bar{5}$  — элемент Коксетера, степень  $h = 10$  которого совпадает с числом ребер в многоугольнике Петри икосаэдра (рис. 1а) [6, 7].

В пространстве 3-мерной сферы  $S^3$ , погруженной в  $E^4$ , угловой дефицит правильных тетраэдров ликвидируется за счет ее постоянной положительной кривизны; при этом реализуется единственно возможное в  $E^n, n \geq 3$  разбиение на правильные тетраэдры. 600 правильных тетраэдров, осуществляющих это разбиение  $S^3$ , образуют политоп  $\{3,3,5\}$  (4-мерный икосаэдр), 120 вершин которого определяют 120 единичных векторов в  $E^4$  с началом в центре  $S^3$ . Этим векторам  $E^4$  соответствуют 120 особых кватернионов — икосианов, которые (относительно операции умножения икосианов [8]) образуют бинарную икосаэдрическую группу  $Y'$  [8, 6, 3, 4].

Все движения в  $E^4$ , совмещающие вершины политопа  $\{3, 3, 5\}$ , образуют подгруппу  $[3,3,5]$  ортогональной 4-мерной группы  $O(4)$ . Группа  $[3, 3, 5]$  порядка 14400 совпадает с прямым произведением  $Y' \times Y'$  групп  $Y'$  и определяется кодом:

$$R_i^2 = (R_1 R_2)^3 = (R_2 R_3)^3 = (R_3 R_4)^5 = (R_1 R_4)^2 = Q^6 = P^{10} = S^{30} = 1, \quad (2)$$

где  $R_i, i = 1, 2, 3, 4$  — порождающие плоскости отражения;  $R_1 R_2 R_3 = Q, R_1 R_3 R_4 = P, R_1 R_2 R_3 R_4 = S$  — элемент Коксетера, степень  $h = 30$  которого совпадает с числом ребер в многоугольнике Петри политопа  $\{3,3,5\}$  [6,7]. Код (2) определяет наличие в политопе  $\{3,3,5\}$  осей, которые в  $E^3$  совпадают с осями вращений на  $2\pi/n, n = 2, 3, 5$  (рис. 1а); обычными (рациональными) винтовыми осями  $n_1, n = 6, 10$  (рис. 1б) и иррациональной винтовой осью  $30/11$ , осуществляющей вращение на  $2\pi \cdot 11/30$  с последующей трансляцией вдоль оси (рис. 1в, г). Эта ось  $30/11$  отображает симметрию 30-реберной спирали Бернала, возникающей в составленной из тетраэдров цепочке Бернала (рис. 1в) и соответствующей многоугольнику Петри политопа  $\{3,3,5\}$  [3,6,7].

В политопе  $\{3,3,5\}$  можно выбрать 120 тетраэдров, центры которых образуют конгруэнтный ему политоп  $\varphi\{3,3,5\}$ , где  $\varphi$  — энантиоморфное вращение в  $E^4, O(4) \ni \varphi \notin [3,3,5]$ ; при этом в каждом икосаэдре из  $\{3,3,5\}$  центрируются 4 тетраэдра, центры которых образуют тетраэдр (рис. 1а). Соединение «белых» вершин исходного политопа  $\{3,3,5\}$  с ближайшими к ним «черными» вершинами политопа  $\varphi\{3,3,5\}$  приводит к образованию в  $S^3$  энантиоморфной структуры из 240 тетракоординированных вершин, соединенных 480 ребрами, которые образуют неплоские гексациклы («твист-ванны»). Эта структура получила название нерегулярного политопа  $\{240\}$  [2,3,4].

Граф политопа  $\{240\}$  представляет собой регулярный бихроматический граф степени 4 и обхвата 6; поэтому политоп  $\{240\}$  можно рассматривать как энантиоморфный алмаз в  $S^3$  и, согласно [9], определять графы его особых кластеров как

подграфы графов инцидентности конечных проективных плоскостей  $PG(2, q)$ ,  $q = 2, 3$ . Такая трактовка политопа  $\{240\}$  позволяет повторить рассуждения [9] и получить (удалением из ТИ  $PG(2, 2)$  набора № 2 из 3 пустых кружков) энантиоморфный граф  $\{6, 3\}_{2,1}^{3(2)}$ , который реализуется в  $E^3$  как 14-вершинное объединение 6 «твист-ванн» (рис. 2а, б).

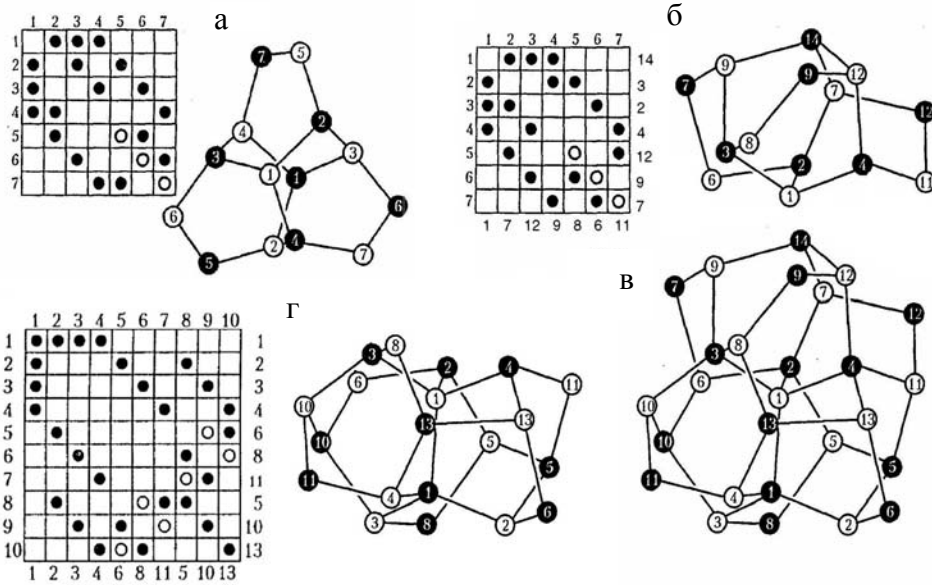


Рис. 2. Ячейки «левого» и «правого» политопа  $\{240\}$ , «вершинная фигура» правого политопа  $\{240\}$  и ее слоевая часть, определяемые таблицами инцидентности соответствующих подконфигураций.

а — Ячейка «левого» политопа  $\{240\}$ , определяемая подконфигурацией  $7_3$ , ТИ которой представляет собой ТИ  $7_3$  без 3 незачерненных кружков.

б — Ячейка «правого» политопа  $\{240\}$ , определяемая ТИ (а), в которой произведена замена строк на столбцы (корреляция). Номера соответствующих вершин кластера (в) указаны справа и снизу от ТИ.

в — «Вершинная фигура» правого политопа  $\{240\}$  как объединение 4-х ячеек (б). Белые вершины 2-13 — икосаэдр, черные вершины: 1-4; 5, 10, 13, 14; 6, 7, 8, 9, 11, 12 — тетраэдр, тетраэдр, октаэдр.

г — Слоевая часть кластера (в), определяемая ТИ расширенной конфигурации Дезарга  $10_3^4$  без пустых кружков. Справа и снизу от ТИ указаны номера соответствующих строк и столбцов из ТИ  $PG(2,3)$ , которая содержит ТИ  $10_3^4$

Этот кластер был выделен в [10], а в [9, 11] он был определен как проекция в  $E^3$  «ячейки» политопа  $\{240\}$ , который в символикe  $\{p, q, r\}$  Шлефли может быть представлен следующим образом:

$$\{240\} = \{3,3,5\} \cup \phi\{3,3,5\} = \{\{6,3\}_{2,1}^{3(2)}, 3\}, \quad (3)$$

где 6 — символ «границ» — гексацикла  $\{p\}$ , общей для двух «ячеек»  $\{p, q\} = \{6,3\}_{2,1}^{3(2)}$ ; 3 — число  $g$  «ячеек» у общего ребра; соответствующий  $\{q, r\}$  тетраэдр  $\{3, 3\}$  — обеспечивает тетракоординированность каждой вершины в  $\{240\}$  и обра-

зование вершинной фигуры  $\{240\}$  [2,4,10,12] из 4 «ячеек»  $\{6, 3\}_{2,1}^{3(2)}$  (рис. 2в). Внутренние скобки в (3) указывает на нерегулярность политопа  $\{240\}$ , отказ от этих скобок приводит к символу  $\{6, 3, 3\}$  особых гиперболических сот [3].

$PG(2, 3)$  содержит расширенную конфигурацию Дезарга  $10_3^4$ , в ТИ  $10 \times 10$  которой содержится 34 знака инцидентности — на 4 больше, чем в ТИ конфигурации Дезарга  $10_3$  [13]. Пересечение подконфигурации  $\{13_4\}^{15}$ , ТИ которой определяется отбрасыванием 15 пустых кружков в ТИ  $PG(2,3)$  [9], и  $10_3^4$  однозначно определяет 20-вершинный кластер — слоевую часть вершинной фигуры политопа  $\{240\}$  (рис. 2г). Впервые этот кластер был выделен в [12] как строительный блок для сборки АС, которые не являются традиционными кристаллографическими объектами [10,12,14].

## 2. Система порождающих кластеров тетраэдрических структур

Если в ПК соединить между собой только белые и только черные вершины, то образуются два полиэдра  $pk_1$  и  $pk_2$ , однозначно определяющие этот ПК (рис. 2, а также рис. 2, 3[1]). Объединение полиэдров с общим центром, вершины которого образуют полиэдр, называется регулярным составным полиэдром [6]. Например, объединение двух тетраэдров, вершины которых образуют куб, — это составной полиэдр  $\{4,3\}[2\{3,3\}]\{3,4\}$ ; в первой скобке символа — обозначение куба, во второй — двух тетраэдров, в третьей — октаэдра, которому принадлежат грани пересечения тетраэдров. Центр ПК не является общим центром  $pk_1$  и  $pk_2$ , поэтому определим ПК как невыпуклый полиэдр, вершины которого совпадают с вершинами нерегулярного составного полиэдра, образованного  $pk_1$  и  $pk_2$ . Такое определение ПК означает возможность перечисления всех симметрично-возможных ПК при определении всех  $pk$  и закона их попарного объединения.

АС — это тетракоординированные структуры, поэтому  $pk$  должно однозначно соответствовать определенное объединение тетраэдров из политопа  $\{3,3,5\}$  [9]. В неприводимые системы образующих группы  $[3,3,5]$  входят лишь элементы Q и P или Q(P) и S (2); это позволяет ограничиться для  $pk$  лишь наборами тетраэдров, которые определяются осями  $b_1$ ,  $10_1$  и  $30/11$ , т.е. принадлежат стержням из (взаимно проникающих) икосаэдров с общей осью 3 или 5 и цепочке Бернала (рис. 1б, в). В основополагающих работах [15,16] были рассмотрены возможные ансамбли из жестких шаров и показано, что случайная упаковка жестких шаров с равными расстояниями между ними (модель идеальной жидкости) содержит только 5 полиэдров пустоты: тетраэдр, октаэдр и три полиэдра Бернала. В [16] были определены конфигурации наиболее вероятного расположения жестких сфер, если число последних достаточно мало. Кроме кластеров из ГЦК-решетки, все конфигурации, названные псевдоячейками, представляют собой объединения (по граням) тетраэдров с числом вершин от 4 до 10. Итак, и полиэдры пустоты, и псевдоячейки характеризуются числом вершин от 4 до 10. Рассматривая это как чисто кристаллографическое требование, мы, таким образом, можем ограничить рост числа вершин в допустимых наборах тетраэдров от 4 до 10.

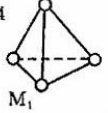
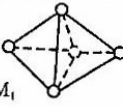
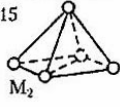
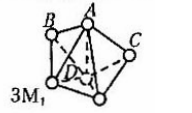
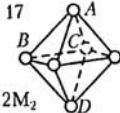
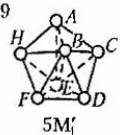
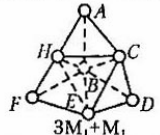
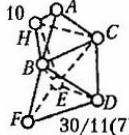
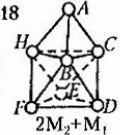
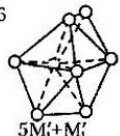
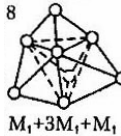
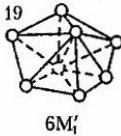
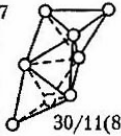
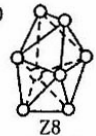
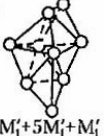
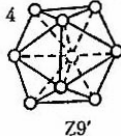
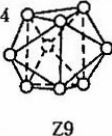
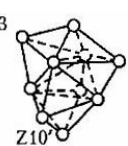
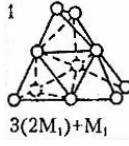
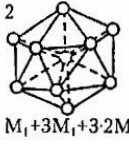
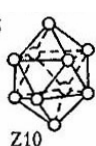
Выпуклость полиэдра является существенным кристаллографическим критерием, поэтому объединения тетраэдров и элементарно-подобные [9] им, но выпуклые (условно-выпуклые [17]) триангулированные полиэдры мы будем считать кристаллографически различными. Если 5 идеальных тетраэдров имеют в  $E^3$  общее ребро, то между гранями первого и пятого остается зазор в 0.104 идеального тетраэдра [3], это определяет особую роль гексагональной бипирамиды. Всего выше-

перечисленным критериям кристаллографического различия удовлетворяют 27 триангулированных полиэдров без «внутренних» ребер и 7 с «внутренним» ребром; число вершин в этих полиэдрах — от 4 до 10.

Структуры, собранные из таких полиэдров (металлы, металлические стекла и т.п. [3,4]) можно назвать тетраэдрическими структурами, а сами эти полиэдры — порождающими кластерами тетраэдрических структур (пк). В силу вышеизложенного, они образуют систему, представленную в форме табл. 1. В I – III столбцах табл. 1 находятся объединения тетраэдров, определяемые осями  $10_1$ ,  $6_1$  и  $30/11$  политопа  $\{3,3,5\}$ ; в IV — выпуклые (условно-выпуклые) полиэдры Залгаллера [17]. Число вершин полиэдров последовательно возрастает от строки к строке, в 4 строке находятся 7-вершинники, которые определяют [18] порождающие элементы группы  $\{3,3,5\}$ . Подробное описание системы пк приведено в [9].

Таблица 1

Система порождающих кластеров тетраэдрических структур

Объединения тетраэдров, определяемые осями политопа $\{3,3,5\}$			Полиэдры пустоты	
Ось $10_1$	Ось $6_1$	Ось $30/11$		
			14  $M_1$	
	13  $2M_1$		15  $M_2$	
	12  $3M_1$		17  $2M_2$	
9  $5M_1'$	11  $3M_1+M_1$	10  $30/11(7)$	18  $2M_2+M_1$	
6  $5M_1'+M_1'$	8  $M_1+3M_1+M_1$	19  $6M_1'$	7  $30/11(8)$	20  $Z_8$
5  $M_1'+5M_1'+M_1'$	4  $Z_9'$		24  $Z_9$	
3  $Z_{10}'$	1  $3(2M_1)+M_1$	2  $M_1+3M_1+3 \cdot 2M_1$	25  $Z_{10}$	

Выпуклая оболочка  $n+1$  точек евклидова пространства, не лежащих в  $(n-1)$ -мерном подпространстве, называется  $n$ -мерным симплексом. Комплексом называется множество, состоящее из симплексов, примыкающих друг к другу по целым граням, причем вместе с симплексом в комплекс входят и все его грани и каждая точка принадлежит лишь конечному числу симплексов. Каждому комплексу  $X$  можно сопоставить группу  $H_n(X)$  — группу гомологии комплекса  $X$ , которая определяет «проекцию» топологии в алгебру. Группы гомологий и когомологий играют важнейшее значение в алгебраической геометрии [18], таким образом, табл. 1 фактически представляет собой систему комплексов, которой соответствует определенная система групп (ко)гомологии и соответствующих им конструкций алгебраической (проективной) геометрии.

### 3. Система порождающих кластеров алмазоподобных структур

Система  $pk$  (табл. 1) позволяет определить ПК как невыпуклый полиэдр, вершины которого являются вершинами нерегулярного составного полиэдра, образованного двумя  $pk$  из системы  $pk$ , а граф (образованный объединением ближайших друг к другу вершин) представляет собой граф инцидентности подконфигурации конечной проективной плоскости  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3,4$  [9]. Если граф ПК образован объединением ближайших друг к другу вершин разных  $pk$ , то граф — бихроматический, собран лишь из гексациклов и определяется дезарговой подконфигурацией  $PG(2,q)$ ; если в ПК ближайшими друг к другу являются и вершины одного  $pk$ , то граф содержит пента(гепта)циклы и определяется недезарговой подконфигурацией  $PG(2,q)$  [1,9].

В общем случае определяющий ПК нерегулярный составной полиэдр может быть образован любыми двумя  $pk$  из табл. 1. Это означает, что получить все симметрично-возможные ПК можно, построив квадрат Кэли табл. 1, т.е. расположив все  $pk$  табл. 1 в строку и столбец, а ПК определять как «произведение»  $pk_i$  из  $i$ -ой строки и  $pk_j$  из  $j$ -го столбца. Множество всех полученных таким образом  $PK_{ij}$  образуют систему ПК. Т.к. в табл. 1 27  $pk$  без внутренних ребер, то система ПК представляет собой квадратную матрицу из 27 строк и 27 столбцов; если возможен и  $PK_{ij}$ , определяемый  $pk$  с внутренними ребрами, то в символе  $PK_{ij}$  вводятся верхний и нижний индексы  $(PK_{ij})_{II}^I$ , и такому ПК соответствует индекс II.

$PK_{ij} = pk_i \sqcup pk_j$  и  $PK_{ji} = pk_j \cup pk_i$  соответствуют энантиоморфным модификациям, поэтому в табл. 2, представляющей часть системы ПК [9], помещен лишь символ  $PK_{ij}$ , а вместо (симметрично расположенного относительно диагонали)  $PK_{ji}$  приводится минимальная конфигурация  $(m_f, n_d)$  или карта, подграфом графа (инцидентности) которой является граф  $PK_{ij}$ . Для самодуальных  $PK_{ii}$ , расположенных на диагонали, эта информация размещается на пересечении  $i$ -го столбца с подтабличной строкой; число вершин  $PK_{ij}$  равна сумме вершин  $pk_i$  и  $pk_j$ . Таким образом, табл. 2 позволяет определить ПК как нерегулярный (бинарный) составной полиэдр:  $PK = (m_f, n_d) \langle i, j \rangle$ , где  $i, j$  — это номера  $pk_i$  и  $pk_j$  из табл. 1; если  $m_f = n_d$  и  $I = j$ , то  $PK = (n_d) \langle I \rangle$ . Например, ПК ВС-8 [1] — это  $PK_{17,19} = (6_4, 8_3) \langle 17, 19 \rangle$ .

Таблица 2

Часть системы ПК, представленная в форме «таблицы умножения» пк строки на пк столбца

	1	6	9	10	11	12	14	15	17	18	19	27
1	Dod'											
6										$\frac{30^{-dc}}{11}$		
9			D <sup>d</sup>	$\frac{40}{9}$						al-Ge		
10			$10_3^4$	$\frac{30}{11}$						$D_2^R$ $L_3^R$		
11					{240}			$L_2^R$				
12						$\frac{30}{11} - 2$				$D_2^{+dc}$		
14							PB $L_1$		D <sub>1</sub>			
15					{3,5}			$M_2^2$				
17							4 <sub>3,6</sub> <sub>2</sub>		L <sub>2</sub>		BC8 <sup>I</sup> <sub>II</sub>	
18		$T_3^2$	$T_3^3$	$\frac{7_3}{(9_3)_2}$		$T_2^2$				D <sub>2</sub> L <sub>3</sub>		
19									6 <sub>4,8</sub> <sub>3</sub>			
27												Dod''
	$10_3^4$		(9 <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	7 <sub>3</sub>	7 <sub>3</sub>	{3,5}	{4,3}	{4,4} <sub>3,1</sub>	{3,5}	$\frac{7_3}{(9_3)_2}$		10 <sub>3</sub>

Порядок размещения пк в строке (столбце) табл. 2 выбран так, чтобы система ПК отображала закономерности строения АС, в частности их деление на три основных типа: «политопно-сотовый», «реально-кристаллический» и «линейно-дефектный». Действительно, блок (1–14)×(1–14) системы ПК определяет ПК, представляющие собой выпрямленные в  $E^3$  кластеры политопов или гиперболических сот; блок (14–27)×(14–27) определяет ПК, являющиеся кластерами реальных кристаллических АС; блок (15–27)×(1–13) определяет ПК, которым соответствуют кластеры АС (кристаллических, политопов, гиперболических сот) с введенными в них линейными дефектами.

Грубо говоря, (1–14)×(1–14), (14–27)×(14–27) и (15–27)×(1–13) – это политопный, кристаллический и линейно-дефектный блоки, выделенные в табл. 2 жирными линиями. Например, ПК ячейки политопа {240} — это  $ПК_{11,11} = (7_3) < 11 >$  (рис. 2а, б); объединение двух пк №18 возможно в двух вариантах:  $ПК_{18,18} = (7_3) < 18 >$



или ПК алмаза  $D_2$  (рис. 2 в [1]) и  $ПК_{18,18} = ((9_3)_2) < 18 >$  или ПК лонсдейлита  $L_3$  (рис. 3а в [1]). Объединение пк №6 и пк №18 определяет ПК  $30/11^{-dc}$  или  $ПК_{6,18} = (T_3^2) < 6,18 >$  (рис. 4 в [1]), который генерирует линейный дефект, возникающий при введении  $-60^\circ$  дисклинации вдоль оси канала  $30/11$  (рис. 1в) политопа  $\{240\}$  [9]. ПК ядра винтовой дислокации в алмазе  $D^d$  или  $ПК_{9,9} = ((9_3)_3) < 9 >$  находится в политопном блоке, но при размещении пентагональной бипирамиды (пк № 9 из табл. 1 без внутреннего ребра) в кристаллическом блоке  $D^d$  (как линейный дефект в алмазе) будет находиться в линейно-дефектном блоке.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уникальность структуры алмаза определяется в первую очередь тем, что она является: 1) алмазной упаковкой — объединением  $D_3^+ = D_3 \cup [1]D_3$ , где  $D_3$  — это ГЦК-решетка; 2) тетраординированной структурой, в которой каждый атом находится в центре правильного тетраэдра; 3) регулярным бихроматическим графом степени 4 и обхвата 6.

Необходимость адекватного отображения симметрии структуры алмаза (уникальность которой сохраняется в значительной степени и для родственных алмазу АС) обусловила необходимость построения ОКАС на основе следующих, тесно связанных между собой разделов алгебраической геометрии. 1) Теории решеток, в которой определена последовательность вложения слоистых решеток:  $A_2 \subset D_3 \subset D_4 \subset \dots \subset E_8 \subset \dots \Lambda_{24}$ , представляющих собой сечения 24-мерной решетки Лича  $\Lambda_{24}$ . Подгруппой группы автоморфизмов  $\Lambda_{24}$  является группа Матье  $M_{24}$ , содержащая подгруппу  $L_3(4)$  — группу автоморфизмов конечной проективной плоскости  $PG(2,4)$ . 2) Теории регулярных разбиений  $S^3$  и  $H^3$ . В частности, реализуемого лишь в  $E^4$  разбиения  $S^3$  на правильные тетраэдры, представляющего собой политоп  $\{3,3,5\}$ , которому соответствует кольцо из 120 икосианов, определяющее и решетку  $E_8$  (а в конечном счете и  $\Lambda_{24}$ ), и тетраординированный политоп  $\{240\}$ . 3) Конечных проективных плоскостей  $PG(2,q)$ , граф инцидентности которых является регулярным бихроматическим гамильтоновым графом степени  $q+1$  и обхвата 6.

Вышеизложенное определило путь построения ОКАС, этапы которого мы конспективно изложим ниже:

1. Отправная точка построения ОКАС — это реализуемость разбиения на правильные тетраэдры лишь в политопе  $\{3,3,5\}$  (4-мерном «икосаэдре»). Порождающие элементы группы  $\{3,3,5\}$  однозначно определяют объединения тетраэдров из  $\{3,3,5\}$  — порождающие кластеры (пк) идеальных тетраэдрических структур: металлов, металлических стекол и т.п. Эти пк и элементарно-подобные [9] им триангулированные полиэдры с числом вершин от 4 до 10 образуют систему пк, содержащую все полиэдры пустоты и квазиячейки, введенные Дж. Берналом для объяснения строения идеальной жидкости.

2. Система пк позволяет определить порождающий кластер идеальной алмазоподобной структуры (ПК) как невыпуклый полиэдр, вершины которого являются вершинами нерегулярного составного полиэдра, образованного двумя пк из системы пк, а граф (образованный объединением ближайших друг к другу вершин этих пк) представляет собой граф инцидентности подконфигурации конечной проективной плоскости  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3,4$ . Метрические соотношения в ПК определяются принадлежностью его «белых» и «черных» вершин к определенным пк из системы пк.

3. Алгоритм выделения подконфигураций плоскости  $PG(2,q)$  основан на выделении из графа инцидентности  $PG(2,q)$  его подграфа, определяющего нерегулярное разбиение сферы. Группой ПК является группа, изоморфная (под)группе коллинеаций и корреляций  $PG(2,q)$ ,  $q = 2,3,4$  и содержащая группу симметрии ПК в качестве подгруппы.

4. Система ПК построена по принципу квадрата Кэли для всех ПК из системы ПК. Каждый ПК определяется как объединение ПК строки и ПК столбца; число вершин в ПК — от 20 до 8; 20-вершинные ПК могут быть трансформированы в додекаэдр [9, 11], что является принципиальным для выделения АС из всего класса тетракоординированных (клатраты, фуллериты и т.п.) структур. Группы равновершинных ПК сопрягаются автоморфизмами группы Матъе  $M_{24}$ , которым соответствуют взаимные трансформации ПК, приводящие к структурным фазовым переходам между генерируемыми ими АС. В конечном счете структура системы ПК определяется строением группы  $M_{24}$ .

5. АС собираются из определенного набора ПК, принадлежащих системе ПК. Например, кристаллические АС в  $E^3$  и  $S^3$  (кристаллы и политопы) генерируются одним ПК; кристаллы с линейными дефектами – минимум двумя (например, алмаз с прослойками лонсдейлита); более сложные детерминированные АС определяются более многочисленными наборами ПК. В общем случае, закон сборки АС определяется соответствием между подконфигурациями конечных проективных плоскостей, определяющих ПК данного набора, и наборами векторов из соответствующих систем (решеток) корней [8, 18].

Наиболее эффективным представляется применение ОКАС для исследований и синтеза тонких пленок, малая толщина которых значительно расширяет возможности согласования напряжений с упругими (и неупругими) характеристиками материала пленки и позволяет получить закономерное, но не кристаллическое распределение линейных дефектов, приводящее к закономерной “осцилляции” допустимых напряжений. В частности, система ПК позволяет априори определять симметрично-возможные максимально детерминированные некристаллические алмазоподобные структуры (МДНАС), одна из которых представлена на рис. 3.

В этой МДНАС каждый ПК 30/11 окружен тремя ПК  $D^{+dc}$  и тремя ПК 30/11<sup>-dc</sup>, составляющих его первую корону. (Впервые модель канала 30/11, окруженного спиралью из чередующихся поперечных пента- и гептациклов с боковыми гексациклами, была построена Н.А. Бульенковым [19].) ПК  $D_2^R$  (скрученный вправо  $D_2$ ) возникает как центральная пустота в цикле из 4 таких первых корон, и его первую корону образуют четыре ПК  $D_2^{+dc}$  и четыре ПК 30/11<sup>-dc</sup> [9,11]. При этом каждый атом в МДНАС принадлежит либо ПК 30/11, либо ПК  $D_2^R$ , что позволяет считать реалистичной возможность сборки этой МДНАС из углеродных остовов молекул диаманта и дитвистана [20,9], совпадающих с ПК  $D_2$  и ПК 30/11.

Данная МДНАС состоит из пента-, гекса- и гептациклов, что позволяет рассматривать ее как максимально детерминированную модель Полка [21]. Особенности строения позволяют МДНАС сохранять основные достоинства алмаза, будучи лишенными его определенных недостатков; например, в силу отсутствия плоскостей симметрии (рис. 3) МДНАС будет лишена присущей алмазу хрупкости. Предварительные расчеты [20] позволяют полагать, что пленка с подобной организацией структуры будет представлять собой более перспективный (по сравнению с получаемыми в настоящее время поликластерными алмазными пленками) однородный, алмазоподобный материал, удовлетворяющий необходимым требованиям для создания слоистых нанoeлектронных систем.

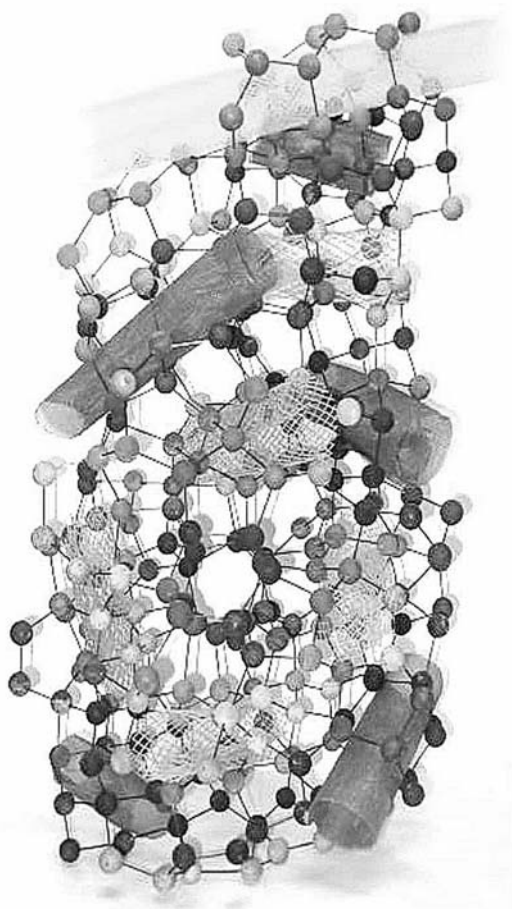


Рис. 3. Общий вид модели максимально детерминированной некристаллической алмазоподобной структуры (МДНАС). Темные и светлые трубки вставлены в «скрученные» алмазные каналы  $D_2^R$  и каналы 30/11 (из политопа {240}), состоящие из темных и светлых атомов соответственно. В центре модели отчетливо виден канал  $D_2^R$  из темных атомов

Автор выражает глубокую признательность В.А. Копцику, Н.А. Бульенкову, Л.И. Циноберу, М.И. Самойловичу, В.С. Крапошину, Е.В. Чупрунову и М.И. Миронову, Ю.П. Буглову, С.А. Монахову за многолетнее постоянное внимание, стимулирующие обсуждения и помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Талис А.Л. // Вестник ННГУ. Серия Физика твердого тела. 2001. Вып. 1(4). С. 88-98.
2. Coxeter H.S.M. // Philos. Trans. R. Soc. London. Ser. A. 1930. Vol. 229. P. 346.
3. Kleman M. // Advances In Physics. 1989. V. 38. № 6. P. 605.
4. Mosseri R., Vincenzo D.P.Di, Sadoc T.F., Brodsky M.H. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. № 6. P. 3974.
5. Коксетер Г.С.М. Введение в геометрию. М.: Наука, 1966. 648 с.
6. Coxeter H.S.M. Regular Polytopes. Dower, New-York, 1973. 321 p.

7. Коксетер Г.С.М., Мозер У.О. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. М.: Наука, 1980. 240 с.
8. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1, 2. 791 с.
9. Талис А.Л. // Синтез минералов. Александров: ВНИИСИМС, 2000. Т. 3. С. 321.
10. Бульенков Н.А. // Биофизика. 1991. Т. 36. № 2. С. 181-242.
11. Талис А.Л. // Труды IV Междунар. конф. «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение». Александров: ВНИИСИМС, 1999. С. 219.
12. Бульенков Н.А. // Кристаллография. 1988. Т. 33. № 2. С. 422-444.
13. Картези Ф. Введение в конечные геометрии. М.: Наука, 1980. 320 с.
14. Bulienkov N.A. // Quasicrystals And Discrete Geometry. The Fields Inst. Monogr. / Ed. by J. Patera. Am. Mathem. Soc., Providence (RI), 1998. V. 10. P. 67.
15. Бернал Дж. // Кристаллография. 1962. Т. 7. № 4. С. 507.
16. Бернал Дж. Рост кристаллов. М.: Наука, 1965. Т. 5. С. 149.
17. Асланов Л.А. Структуры веществ. М.: МГУ, 1989. 161 с.
18. Шафаревич И.Р. Основные понятия алгебры. Ижевск: Ижевская республиканская типография, 1999. 348 с.
19. Bul'enkov N.A., Synober L.I. 12-th European crystallographic meeting. Collected abstract. Moscow, 1989. V. 2. P. 45.
20. Талис А.Л., Самойлович М.И., Миронов М.И. // Матер. X межд. симп. «Тонкие пленки в электронике». Часть 1. Ярославль, 1999. С. 19.
21. Polk D.E. // J. Non-Cryst. Solids. 1971. V. 5. P. 365.