

УДК 548.1

**РАЗБИЕНИЕ СТРУКТУРИРОВАННОГО 3D ПРОСТРАНСТВА
НА МОДУЛЯРНЫЕ ЯЧЕЙКИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕВЫРОЖДЕННЫХ МОДУЛЯРНЫХ СТРУКТУР****Иванов В.В., Таланов В.М.***Южно-Российский государственный технический университет (НПИ),
Новочеркасск, e-mail: valtalanov@mail.ru*

Обсуждаются разбиения 3D пространства на модулярные ячейки с целью последующего конструирования невырожденных модулярных 3D структур кристаллов.

Ключевые слова: структурирование пространства, структурный модуль, модулярный дизайн

**SPLITTING OF STRUCTURED 3D SPACES ON MODULAR CELLS
AND MODELLING OF NONDEGENERATE MODULAR STRUCTURES****Ivanov V.V., Talanov V.M.***The South Russian state technical university (Novocherkassk polytechnic institute),
e-mail: valtalanov@mail.ru*

Splitting of 3D spaces on modular cells for the purpose of the designing of nondegenerate modular 3D structures of crystals are discussed.

Keywords: structuring of space, structural module, modular design

Проблема разбиения 3D пространства на ячейки с одинаковыми геометрическими и топологическими характеристиками является одной из важных и актуальных проблем модулярного дизайна. В соответствии с принципом модулярного строения кристаллов [1] в каждой кристаллической структуре может быть выбран по определенному алгоритму структурный модуль с необходимыми конфигурацией и топологическими характеристиками, соответствующий по составу формульной единице вещества [2]. С помощью данного модуля может быть получено определенное множество модулярных структур, генетически связанных с инициальной модульной структурой, но отличающихся друг от друга характером их позиционного и ориентационного упорядочения в 3D пространстве [3, 4]. Данная формулировка принципа модулярного строения кристаллов предполагает разбиение структурированного пространства на модулярные ячейки, которые уже содержат предписанный алгоритмом структурный модуль. Рассмотрим формально возможные варианты решения задачи разбиения структурированного пространства.

Вариант 1. *Разбиение структурированного пространства.* Разбиение структурированного пространства, т.е. разбиение кристаллического пространства заданного структурного типа кристалла, на модулярные ячейки и идентификация структурного модуля (базового характеристического модуля структуры [1]) может быть осуществ-

лено по разработанному алгоритму [2]. Однако в этом случае может быть получена соответствующая модулярная ячейка, которая характеризует только одну, вырожденную модулярную структуру. Поэтому с целью получения множества модулярных структур осуществляют целенаправленное модифицирование базового модуля до получения соответствующих модулярных ячеек с необходимыми топологическими характеристиками.

Модифицирование модуля проводится путем закономерного изменения его конфигурации за счет изменения степени изолированности и чисел принадлежности атомов на границах. Подобное дискретное модифицирование базового структурного модуля необходимо для того, чтобы определить весь ряд возможных для анализируемого структурного типа и генетически связанных с ним модулярных ячеек с достаточными для дизайна характеристиками [2]. В результате модифицирования может быть получен ряд идентичных по составу структурных модулей, отличающихся конфигурацией и топологическими характеристиками. Полученные в результате описанных процедур модулярные ячейки и соответствующие структурно совместимые с ними модули могут быть использованы для модулярного дизайна [5]. Дизайн множества модулярных структур осуществляется путем вложения модулей в ячейки по определенному упаковочному закону, регулируемому их различие в позиционной и ориентационной

компонентах упорядоченности в ячеистом пространстве [4, 5].

Вариант 2. *Структурирование пространства и его разбиение.* Рассмотрим варианты разбиения пространства на модулярные ячейки после предварительного структурирования. Структурирование пространства может быть осуществлено с помощью, например, определенной базовой совокупности атомов, в качестве которых можно рассматривать заполненные ими вершины упакованных в пространстве правильных и полуправильных изогонов, соответствующих одной из 28 известных комбинаций [6, 7]. Поскольку для любой из этих комбинаций изогонов вершины изогонов образуют правильную систему точек, то в результате разбиения могут быть получены одинаковые модулярные ячейки в форме соответствующих атомных многогранников Вороного-Дирихле. Центрами этих многогранников являются топологически эквивалентные вершины изогонов, вершинами – их геометрические центры [5].

Состав полученных описанным выше способом одноатомных модулярных ячеек может быть усложнен путем закономерного заполнения всех типов вершин многогранника атомами другого сорта. Для каждой комбинации изогонов может быть получено множество модулярных ячеек с многоатомными структурными фрагментами, описывающее соответствующее множество вырожденных модулярных структур. Эти вырожденные модулярные структуры могут рассматриваться как один из вариантов модульного представления родственных структурных типов кристаллов (т.е. основанных на одной и той же базовой упаковке атомов) с одинаковым характером упаковки модулей [3, 6].

Для получения множества невырожденных модулярных структур необходима такая же процедура целенаправленного модифицирования структурного модуля, как и в варианте 1. Изменения конфигурации структурного модуля и соответствующей геометрии и топологии модулярной ячейки проводятся до получения такой инициальной структуры, модули которой пригодны для последующего модулярного дизайна [2].

Отметим, что решение задачи о разбиении пространства непосредственно затрагивает проблему формирования модулярной ячейки. Однако в описанных вариантах для этого используется один и тот же прием: целенаправленное модифицирование ячейки некоторой вырожденной модуляр-

ной структуры. Это модифицирование проводится путем изменения конфигурации и топологии структурного модуля-ячейки либо при неизменном составе модуля (вариант 1), либо сохранении формы ячейки (вариант 2). Рассмотрим другие варианты получения модулярной ячейки, которые не связаны с разбиением 3D структурированного пространства, а основаны на выводе из ячеек-модулей, принадлежащих к пространству другой мерности.

Вариант 3. *Вывод ячеек-модулей из ячеек структурированного 2D пространства.* В данном случае для получения модулярных ячеек достаточно воспользоваться готовыми кристаллохимическими решениями для ячеистого 2D пространства [6–8]. Поскольку для решения задачи необходимы 2D ячейки с одинаковой кристаллохимической топологией узлов (имеется в виду топология окружения), для этого можно использовать набор из 11 топологически различных сеток Кеплера или некоторые из двухцветных сеток Кеплера-Шубникова с топологически эквивалентными узлами [6, 7]. Если в качестве узлов указанных сеток рассматривать атомы определенного сорта, то получим структурированное 2D пространство. С помощью разбиения Дирихле для каждой атомной сетки с топологически и кристаллографически эквивалентными атомами получим соответствующие сетки из одинаковых (модулярных) ячеек 2D структур [7].

Будем искать необходимую форму модулярных ячеек 3D структур, представляя их как гиперячейки, в качестве низко размерного прообраза которых являются описанные выше ячейки 2D структур. Использование приема удвоения узлов модулярных ячеек 2D структур путем их разведения в ортогональном к 2D пространству направлении в параллельные плоскости приведет в общем случае к образованию из каждой $\{n\}$ -гональной ячейки соответствующей призматической $\{n44\}$ -ячейки вероятной 3D структуры [3]. Отметим, что полиэдрические слои и атомные сетки уже могут быть использованы для получения соответствующего множества невырожденных модулярных структур, представляющих собой политипные модификации исходной слоистой модулярной структуры. В зависимости от способа (варианты 1 и 2) целенаправленного модифицирования состава и формы модулярных ячеек, а также изменения конфигурации и топологии вложенных в них структурных модулей, для каждой слоистой

вырожденной модулярной структуры могут быть получены ряды невырожденных модулярных 3D структур.

Вариант 4. *Вывод ячеек-модулей из гиперячеек 4D пространства.*

Вариант 4-1. *Вывод ячеек-модулей из гиперячеек структурированного 4D пространства.* В данном случае могут быть эффективно использованы правильные многоячеечники (политопы) 4D пространства, которые характеризуются топологически идентичными узлами и одинаковыми ячейками-полиэдрами, а также образуют в 4D пространстве компактные упаковки. Тогда систему узлов 4D решетки можно рассматривать как правильную систему точек, на основе которой разбиением Вороного-Дирихле может быть получена ячеистая структура, соответствующая вырожденной модулярной структуре в 4D пространстве. Одной из очевидных инициальных гиперячеек, образующих компактные упаковки в соответствующем пространстве, является гиперкуб (8-ячеечник) – один из семи правильных политопов 4D пространства, все «грани» (ячейки) которого – кубы.

Для получения геометрических образов этих модулярных гиперполиэдрических структур в 3D пространстве используют их проективные отображения, а также, если это необходимо, последующие топологические преобразования этих образов до получения модулярной структуры с соответствующим внутренним строением и оболочкой, включающей топологически эквивалентные узлы [9]. В качестве допустимых топологических преобразований образов гиперячеек в модулярные ячейки вероятных невырожденных структур обычно используют сплитинг-преобразование узлов, стеллейшн-дизайн граней, стретч оупен-дизайн ячеек-полиэдров и Дирихле-преобразование системы узлов [10]. В результате преобразований форма образа гиперячейки (без учета внутреннего строения) должна соответствовать одной из форм известных простых модулярных ячеек, которые уже использовались для получения невырожденных модулярных структур. Необходимо отметить, что полученные по данному варианту ячейки-модули обладают, в отличие от полученных ранее по вариантам 1–3, дополнительными внутренними элементами-узлами и характеризуют более сложные по составу вероятные модулярные структуры.

Вариант 4-2. *Вывод ячеек-модулей из гиперячеек неструктурированного 4D пространства.* В этом случае для получения

модулярных ячеек 3D пространства могут быть использованы и некоторые из полуправильных политопов гиперпространства. В частности, ими могут быть такие клеточные комплексы (например, тригональная и гексагональная гиперпризмы, гипердодекаэдр и др.), проективные геометрические образы которых в 3D пространстве, а также модифицированные допустимыми преобразованиями варианты этих образов (в соответствии с указанными в варианте 4-1), включают в свою оболочку топологически идентичный набор узлов. Тогда, если компактные упаковки полученных ячеек-модулей соответствуют упаковке одной из 28-ми известных комбинаций правильных и полуправильных изогонов, то ими можно структурировать 3D пространство [6, 7]. В отличие от варианта 2 результатом данного варианта вывода могут быть ячейки-модули, наделенные дополнительными внутренними структурными элементами, и полученные из этих модулей соответствующие множества невырожденных модулярных структур.[3].

В заключение отметим, что формально все модулярные ячейки, полученные по вариантам 3 и 4 из гиперячеек, могут быть подвергнуты процедуре целенаправленного модифицирования состава, конфигурации и топологии вложенных в них структурных модулей для получения новых ячеек-модулей множеств невырожденных модулярных структур.

Список литературы

1. Иванов В.В., Таланов В.М. Принцип модулярного строения кристаллов // Кристаллография. – 2010. – Т.55, № 3. – С. 385–398.
2. Иванов В.В., Таланов В.М. Алгоритм выбора структурного модуля и модулярный дизайн кристаллов // Ж. неорганической химии. – 2010. – Т.55, № 6. – С. 980–990.
3. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
4. Иванов В.В., Таланов В.М. Комбинаторный модулярный дизайн шпинелеподобных фаз // Физика и химия стекла. – 2008. – Т.34, №4. – С. 528–567.
5. Ferraris G., Makovicky E., Merlino S. Crystallography of modular structures. – IUC Oxford Science Publications, 2008. – 370 p.
6. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987. – 276 с.
7. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.
8. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. Информация и структура в наномире: модулярный дизайн двумерных полигонных и полиэдрических наноструктур // Совр. наукоемкие технологии. – 2010. – №10. – С. 176–179.
9. Wells A.F. Three-dimensional nets and polyhedra. – N.Y.: Wiley-Interscience, 1977.
10. Блатов В.А. Методы топологического анализа атомных сеток // Журнал структурной химии. – 2009. – Т.50. – С. 166–173.