

УДК 548.1

ПОЛУЧЕНИЕ ВЕРОЯТНЫХ МОДУЛЯРНЫХ ЯЧЕЕК СТРУКТУР КРИСТАЛЛОВ ИЗ СИМПЛЕКСА 4D ПРОСТРАНСТВА

Иванов В.В., Таланов В.М.

Лаборатория дизайна новых материалов Южно-Российского государственного технического университета, e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru

Обсуждаются алгоритм получения вероятных фрагментов модулярных ячеек из симплекса 4D пространства и результаты описания ближнего порядка атомов в кристаллах и возможной гиперкоординации атомов углерода в некоторых классах органических соединений.

Ключевые слова: модулярная ячейка, клеточный комплекс, координационный полиэдр, гиперкоординированный углерод

RECEIPT ALGORITHM OF PROBABLE MODULAR CELLS OF CRYSTAL STRUCTURES FROM SIMPLEX OF 4D SPACE

Ivanov V.V., Talanov V.M.

Laboratory of novel materials design, South-Russian state Engineering University, e-mail: valtalanov@mail.ru, valivanov11@mail.ru

Receipt algorithm of probable fragments of modular cells from simplex and some other cellular complexes of the 4D space with quantity no more than sixteen cells, the description of neighbouring order atoms in crystals and possible hyper co-ordination carbon atoms in some organic compounds classes were discussed.

Keywords: modular cell, cellular complex, coordination polyhedron, hyper coordinated carbon atom

Проанализируем возможные варианты геометрической реализации определенно-го клеточного комплекса 4D-пространства в 3D-пространстве на примере симплекса. При описании топологических преобразований гиперячеек использовали следующий вид символического представления симплекса и его возможных топологических производных: $NPh - \langle N_v, N_e, N_f, N_{ph} \rangle \{N_{ph}, ph_i\}$. Данное представление гиперполиэдра содержат информацию о его наименовании (NPh), количестве вершин (v), ребер (e), граней (f), а также количестве и типе ячеек-полиэдров (ph).

Простейший клеточный комплекс 4D-пространства – симплекс – является одним из семи известных автомодулярных политопов этого пространства, т.к. состоит из пяти топологически одинаковых тетраэдрических ячеек: $S_T - \langle 5, 10, 10, 5 \rangle \{T^5\}$ [1, 2]. В 3D-пространстве ему соответствует, в частности, проективное симметричное

изображение в виде центрированного тетраэдра. После определенных топологических преобразований [3] этого образа симплекса возможно получение в 3D пространстве набора соответствующих геометрических образов, которые могут быть изоморфны некоторым конфигурациям определенного комплекса атомов, образующих ближний порядок в структурах кристаллов.

Геометрический образ, соответствующий тетраэдрическому симплексу S_T – центрированный тетраэдр $T_c - \langle 4 + 1, 6, 4 \rangle (I, c \text{ симметрией } T_d)$. Для получения других вероятных геометрических образов симплекса в 3D-пространстве можно воспользоваться результатами топологических преобразований его оболочки.

В результате сплиттинг-преобразования вершин и стелешн-дизайна граней симплекса можно получить следующую цепочку центрированных конфигураций:

Симплекс $S_T - \langle 5, 10, 10, 5 \rangle \{T^5\} \rightarrow$
 лавесовский тетраэдр $L'T_c - \langle 13, 30, 26, 9 \rangle \{L'T, T^4, N_{\text{туп}}^4\} \rightarrow$
 октаэдр $O_c - \langle 7, 18, 20, 8 \rangle \{T^8\} \rightarrow$
 усеченный куб $tC_c - \langle 25, 60, 50, 15 \rangle \{tC, T^8, O_{\text{туп}}^6\} \rightarrow$
 куб $C_c - \langle 9, 17, 12, 7 \rangle \{C, T_{\text{туп}}^6\}$.

Им соответствуют центрированные геометрические образы тетраэдра Лавеса $L'T_c - \langle 12 + 1, 18, 8 \rangle (II, T_d)$,

октаэдра $O_c - \langle 6 + 1, 12, 8 \rangle (III, O_h)$, усеченного куба $tC_c - \langle 24 + 1, 36, 14 \rangle (IV, O_h)$ и куба $C_c - \langle 8 + 1, 12, 6 \rangle (V, O_h)$.

В результате стретч-оупен-дизайна тетраэдрического симплекса через одну из его граней получим еще две конфигурации:

Симплекс $S_T - \langle 5, 10, 10, 5 \rangle \{T^5\} \rightarrow$

Симплекс с центрированной гранью $S_{fc} - \langle 4 + 1, 6 + 4, 4 + 6, 4 \rangle \{T^4, \{3\}_c\} \rightarrow$

Тригондипирамида $T_{\{3\}dipy} - \langle 3 + 2, 9, 6 + 1, 2 \rangle \{T^2\}$.

Соответствующие геометрические образы – одногранецентрированный тетраэдр $T_{fc} - \langle 4 + 1, 6, 4 \rangle (VI, C_{3v})$ и тригональная дипирамида $T_{\{3\}dipy} - \langle 3 + 2, 9, 6 \rangle (VII, C_{3h})$.

Преобразование производных от симплекса конфигураций в их дуальный образ за счет превращения геометрических центров ячеек в вершины, а граней – в ребра приводит к образованию только двух новых конфигураций. Им соответству-

ют центрированные геометрические образы дитетраэдра $diT_c - \langle 4 + 4 + 1, 12, 8 \rangle (VIII, T)$ и объединения куба и октаэдра $(C + O)_c - \langle 8 + 6 + 1, 12 + 12, 6 + 8 \rangle (IX, O_h)$. Здесь и ранее приведены самые симметричные конфигурации.

Описание форм оболочек ячеек-модулей, которые могут быть получены из симплекса 4D пространства, их симметрия и состав представлены в таблице.

Описания ячеек-модулей, которые могут быть получены из правильного политопа – тетраэдрического симплекса

Симплекс	Форма оболочки ячейки-модуля, ее симметрия и состав
Тетраэдрический $S_T - \langle 5, 10, 10, 5 \rangle \{T^5\}$	(I) тетраэдр $T_c - \langle 4 + 1, 6, 4 \rangle (T_d) (AA_4)$
	(II) тетраэдр Лавеса $L'T_c - \langle 12 + 1, 18, 8 \rangle (T_d) (AX_{12})$
	(III) октаэдр $O_c - \langle 6 + 1, 12, 8 \rangle (O_h) (AX_6)$
	(IV) усеченный куб $tC_c - \langle 24 + 1, 36, 14 \rangle (O_h) (AX_{24})$
	(V) куб $C_c - \langle 8 + 1, 12, 6 \rangle (O_h) (AX_8)$
	(VI) одногранецентрированный тетраэдр $T_{fc} - \langle 4 + 1, 6, 4 \rangle (C_{3v}) (AA_3A)$
	(VII) тригонбипирамида $T_{\{3\}dipy} - \langle 3 + 2, 9, 6 \rangle (C_{3h}) (A_3)$
	(VIII) дитетраэдр $diT_c - \langle 4 + 4 + 1, 12, 8 \rangle (T) (AX_4Y_4)$
	(IX) куб + октаэдр $(C + O)_c - \langle 8 + 6 + 1, 12 + 12, 14 \rangle (O_h) (AX_8Y_6)$

Полученные из тетраэдрического симплекса пять вариантов вероятных ячеек-модулей (I, III, V, VII и IX) содержат эквивалентный вершинам центральный элемент, что обуславливает нестандартность их конфигураций. Некоторые из этих ячеек-модулей (I–III, IX) являются неизолированными координационными полиэдрами, характеризующими ближний порядок в кристаллических структурах таких простых веществ как алмаз, кремний, германий, олово (серое), в отдельных подрешетках структур сложных веществ (подрешетка кремния в структурах а и b-кварца, b тридимита, b-кristобалита, подрешетка кислорода в структуре плотного льда-II), структурах интерметаллидов и сплавов со структурной разупорядоченностью атомов [4-6]. Ячейка-модуль IX является, в частности, одной из трех наиболее распространенных геометрических конфигураций, характеризую-

щих ближний порядок с координационным числом 14 в структурах металлов и разупорядоченных твердых растворов на их основе (ОЦК структуры щелочных металлов, d-металлов V и VI групп и др.) [4, 5]. Оболочки конфигураций III–V, VIII (т.е. ячейки-модули без центрального атома) часто используются как изолированные и неизолированные полиэдры при описании особенностей кристаллохимического строения сложных соединений с преимущественно ионно-ковалентным характером связей между атомами [6].

Таким образом, на примере вероятных ячеек-модулей, которые могут быть получены из тетраэдрического симплекса, получена релевантная информация о ближнем порядке в некоторых решетках и подрешетках кристаллов. Следует отметить, что только конфигурации V и IX из девяти полученных выше (таблица) являются ячейками-модуля-

ми возможных модулярных структур (см., например, [7–12]) с учетом особенностей их формирования [13, 14].

Список литературы

1. Стюарт Я. Концепции современной математики: пер. с англ. Н.И. Плужниковой и Г.М. Цукерман – Минск: Выш. школа, 1980. – 384 с.
2. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: Физматлит, 2010. – 264 с.
3. Блатов В.А. Методы топологического анализа атомных сеток // Журнал структурной химии, 2009. – Т.50. – С. 166–173.
4. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов: пер. с англ.; под ред. С.Н. Горина. – М.: Мир, 1977. – Ч. 1. – 420 с.; Ч. 2. – 472 с.
5. Крипякевич П.И. Структурные типы интерметаллических соединений. – М.: Наука, 1977. – 290 с.
6. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3-х томах: пер. с англ.; под ред. М.А. Порай-Кошица и П.М. Зоркого. – М.: Мир, 1987/88. – Т.1. – 408 с.; Т.2. – 696 с.; Т.3. – 564 с.
7. Ferraris G., Makovicky E., Merlino S. Crystallography of modular structures. – IUC Oxford Science Publications, 2008. – 370 p.
8. Иванов В.В., Таланов В.М. Принцип модулярного строения кристаллов // Кристаллография. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 385–398.
9. Иванов В.В., Таланов В.М. Алгоритм выбора структурного модуля и модулярный дизайн кристаллов // Журнал неорганической химии. – 2010. – Т. 55, № 6. – С. 980–990.
10. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
11. Иванов В.В., Таланов В.М. Комбинаторный модулярный дизайн шпинелеподобных фаз // Физика и химия стекла. – 2008. – Т. 34. – № 4. – С. 528–567.
12. Иванов В.В., Таланов В.М. Модулярное строение наноструктур: Информационные коды и комбинаторный дизайн // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – Т.1. – № 1. – С. 72–107.
13. Иванов В.В., Таланов В.М. Разбиение и структурирование пространства, описание процесса формирования модульного кристалла // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 8. – С. 75–77.
14. Иванов В.В., Таланов В.М. Формирование структурного модуля для модулярного дизайна в 3D-пространстве // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 9. – С. 74–77.