

УДК 548.1

## ВЫВОД ВЕРОЯТНЫХ МОДУЛЯРНЫХ ЯЧЕЕК СТРУКТУР КРИСТАЛЛОВ ИЗ ГИПЕРКУБА 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

Обсуждается алгоритм получения вероятных фрагментов модулярных ячеек из гиперкуба 4D-пространства. Проанализированы вероятные описания оболочек ячеек-модулей, полученные из симметричной проекции гиперкуба, описания ближнего порядка атомов в кристаллах и гиперкоординации атомов углерода в некоторых классах органических соединений.

**Ключевые слова:** модулярная ячейка, гиперкуб, координационный полиэдр, гиперкоординированный углерод

## RECEIPT ALGORITHM OF PROBABLE MODULAR CELLS OF CRYSTAL STRUCTURES FROM CELLULAR COMPLEXES 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 hypercube of the 4D space was discussed. The possible descriptions of cells-modules covers received from symmetric hypercube projection, the descriptions of neighbouring order atoms in crystals and hyper co-ordination carbon atoms in some organic compounds classes were analyzed.

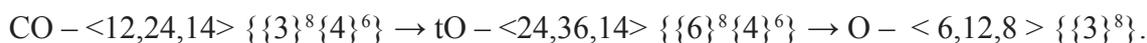
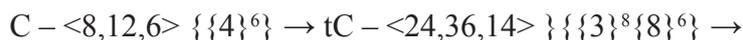
**Keywords:** modular cell, hypercube, coordination polyhedron, hyper coordinated carbon atom

Гиперкуб является одним из семи известных автомодулярных политопов 4D-пространства, т.к. состоит из восьми топологически одинаковых кубических ячеек: HC-  $\langle 16, 32, 24, 8 \rangle \{C^8\}$  [1]. Все его геометрические образы, полученные с помощью определенных топологических преобразований в 3D-пространстве, обладают дополнительными по сравнению с кубом геометрическими элементами и могут быть использованы при интерпретации нестандартных конфигураций, описывающих ближний порядок в структурах некоторых координационных соединений, особенности стереохимии некоторых молекул органических и металлоорганических соединений и другие структурные аномалии. [2, 3].

Геометрический образ, соответствующий гиперкубу HC – куб внутри куба  $C_{(C)} - \langle 8 + 8, 12 + 12, 6 + 6 \rangle$  (с симметрией  $O_h$ ). Для получения других вероятных геометрических образов из симплекса в 3D-пространстве можно воспользоваться

результатами его топологических преобразований. При описании топологических преобразований гиперячеек использовали следующий вид символического представления симплекса и его возможных топологических производных:  $HPh - \langle N_v, N_e, N_f, N_{ph} \rangle \{N_{ph}, ph_i\}$ . Данное представление гиперполиэдра содержат информацию о его наименовании ( $HPh$ ), количестве вершин ( $v$ ), ребер ( $e$ ), граней ( $f$ ), а также количестве и типе ячеек-полиэдров ( $ph$ ).

Рассмотрим топологические преобразования гиперкуба в предположении, что каждая его ячейка, прилегающая к оболочке, подчиняется правилам геометрико-топологических преобразований в 3D-пространстве. Известные топологические преобразования куба [4]: куб  $\{444\} \rightarrow$  усеченный куб  $\{388\} \rightarrow$  кубооктаэдр  $\{3434\} \rightarrow$  усеченный октаэдр  $\{466\} \rightarrow$  октаэдр  $\{3333\}$  в используемых здесь обозначениях могут быть представлены в виде следующей цепочки:



По аналогии, можно ввести следующие обозначения для изменяющихся оболочек гиперполиэдра: усеченный куб  $tC_{(C)} - \langle 32, 68, 56, 16 \rangle \{ tC \ C \ T^8 \ tOupr^6 \}$ , кубооктаэдр  $CO_{(C)} - \langle 20, 60, 64, 16 \rangle$

$\{ CO \ C \ T^8 \ Tapr^6 \}$ , усеченный октаэдр  $tO_{(C)} - \langle 32, 80, 68, 28 \rangle \{ tO \ C \ Nrupr^8 \ T^{12} \ Napr^6 \}$ , октаэдр  $O_{(C)} - \langle 14, 48, 54, 28 \rangle \{ O \ C \ Trupr^6 \ T^{20} \}$ . Здесь и далее конфигурации всех ячеек гиперполиэдров и их вершинная тополо-

гия представлены в фигурных { } и угловых <> скобках, соответственно. Буквенные обозначения *t*, *p*, *ap*, *pyr* приведены по первым буквам соответствующих терминов (truncated, prism, anti-prism, pyramid).

$$\begin{aligned} &HC_{(C)} - \langle 16, 32, 24, 8 \rangle \{C^8\} \rightarrow tC_{(C)} - \langle 32, 68, 56, 16 \rangle \{tC C T^8 tOpyr^6\} \rightarrow \\ &CO_{(C)} - \langle 20, 60, 64, 16 \rangle \{CO C T^8 Tap^6\} \rightarrow \\ &tO_{(C)}^{d1} - \langle 32, 80, 68, 28 \rangle \{tO C Hpyr^8 T^{12} Nap^6\} \rightarrow \\ &O_{(C)}^{d2} - \langle 14, 48, 54, 28 \rangle \{O C Tpyr^6 T^{20}\}. \end{aligned}$$

Им соответствуют центрированные кубометрические образы усеченного куба  $tC_{(C)} - \langle 4 + 8, 36 + 12, 14 + 6 \rangle$ , кубоктаэдра  $CO_{(C)} - \langle 12 + 8, 24 + 12, 14 + 6 \rangle$ , усеченного октаэдра  $tO_{(C)} - \langle 24 + 8, 36 + 12, 14 + 6 \rangle$  и октаэдра  $O_{(C)} - \langle 6 + 8, 12 + 12, 8 + 6 \rangle$ .

При всех этих преобразованиях предполагается, что изолированная от оболочки симметричной проекции кубическая ячейка не подчиняется правилам геометрико-топологических преобразований в 3D-пространстве, т.е. сохраняет свою форму и ориентацию относительно преобразующихся ячеек. Символы дуальности относятся только к внешней границе гиперячейки и характеризуют ее ориентацию либо по отношению к внешней границе исходной гиперячейки (*d1*), либо по отношению к внутреннему изолированному домену (*d2*). Отметим, что при данных геометрико-топологических преобразованиях вершины гиперячейки перестают быть топологически эквивалентными и расслаиваются на две группы: постоянную группу вершин внутреннего домена и переменную группу вершин преобразующейся оболочки проекции гиперячейки.

Преобразование производных от гиперкуба конфигураций в их дуальные образы за счет превращения геометрических центров ячеек в вершины, а граней – в ребра приводит к образованию следующих трех новых конфигураций. Им соответствуют центрированные геометрические образы дитетраэдра  $dtT_c - \langle 4 + 4 + 1, 12, 8 \rangle$ , объединения куба и октаэдра  $(C + O)_{2c} - \langle 8 + 6 + 1, 12 + 12, 6 + 8 \rangle$  и объединения куба, октаэдра и кубоктаэдра  $(C + O + CO)_{2c} - \langle 8 + 6 + 12 + 1, 12 + 12 + 24, 6 + 8 + 14 \rangle$ . При описании симметрии геометрических образов приведены самые симметричные конфигурации.

В результате стретч-оупен-дизайна гиперкуба через его грани получим еще

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

несколько конфигураций: центрированную квадратом гексагональную призму  $Hr(\{4\}) - \langle 12 + 4, 22 + 16, 9 + 16, 10 \rangle \{Hr, \{4\}, Tr^7, \frac{1}{2}I^2\}$ , октагональную призму  $Op - \langle 16, 24, 10, 1 \rangle \{Op\}$ , триплет из тетрагональных антипризм  $3Tap - \langle 8 + 8, 12 + 8 + 12, 20 + 8, 3 \rangle \{Tap^3\}$ . Соответствующие геометрические образы – центрированная тетрагоном гексагональная призма  $Hr_{(4)} - \langle 12, 22, 9 \rangle$ , октагональная призма  $Op_{(4)} - \langle 16, 24, 10 \rangle$ , объединение трех тетрагональных антипризм  $3Tetap - \langle 16, 32, 26 \rangle$ . Еще четыре геометрических образа оболочек ячеек-модулей могут быть получены путем вытягивания вершин внутреннего октаэдра на внешнюю координационную сферу: куб + усеченный куб  $(C + tC) - \langle 8 + 24, 12 + 36, 6 + 14 \rangle$ , куб + кубоктаэдр  $(C + CO) - \langle 8 + 12, 12 + 24, 6 + 14 \rangle$ , куб + усеченный октаэдр  $(C + tO) - \langle 8 + 24, 12 + 36, 6 + 14 \rangle$  и куб + октаэдр  $(C + O) - \langle 8 + 6, 12 + 12, 6 + 8 \rangle$ .

Описания форм оболочек всех вероятных симметричных форм ячеек-модулей, полученных из симметричной проекции гиперкуба, а также их символьные обозначения, симметрия и качественный состав приведены в табл. 1.

Все приведенные в таблице атомные конфигурации являются известными в кристаллохимии неорганических кристаллов [4–8]. Однако не все они являются такими модулями, с помощью которых можно без пропусков заполнить 3D-пространство [4, 5]. Большинство этих модулей по конфигурации являются преобразованными комбинациями правильных и полуправильных изогонов [8]. Симметрия этих ячеек-модулей в вырожденных модулярных структурах может быть разной [9–13].

Среди ячеек-модулей, указанных в табл. 1, имеются и дельтаэдрические ячейки. Они представлены в основном *n*-гонбипирамидальными полиэдрами (где  $n = 3 - 6$ , табл. 2). Оболочки дельтаэдров могут быть каркасами молекул и молеку-

лярных комплексов различных органических и металлоорганических соединений [2, 3]. Поэтому от позиционирования кар-

касного атома углерода в составе группы СН существенно зависит его координация.

Таблица 1

Описания оболочек ячеек-модулей, полученных из симметричной проекции гиперкуба.

Гиперячейка	Форма оболочки ячеек-модулей, их симметрия и состав
Гиперкуб HC <16,32,24,8> {C <sup>8</sup> }	куб C <sub>(C)</sub> – <8 + 8, 12 + 12, 6 + 6> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>8</sub> A <sub>8</sub> )
	усеченный куб tC <sub>(C)</sub> – <24 + 8, 36 + 12, 14 + 6> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>8</sub> X <sub>24</sub> )
	кубооктаэдр CO <sub>(C)</sub> – <12 + 8, 24 + 12, 14 + 6> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>8</sub> X <sub>12</sub> )
	усеченный октаэдр tO <sub>(C)</sub> – <24 + 8, 36 + 12, 14 + 6> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>8</sub> X <sub>24</sub> )
	октаэдр O <sub>(C)</sub> – <6 + 8, 12 + 12, 8 + 6> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>8</sub> X <sub>6</sub> )
	дитетраэдр diT <sub>c</sub> – <4 + 4 + 1, 12, 8> (T <sub>h</sub> ) (AX <sub>4</sub> Y <sub>4</sub> )
	куб + октаэдр (C + O) <sub>2c</sub> – <8 + 6 + 1, 12 + 12, 6 + 8> (O <sub>h</sub> ) (AX <sub>8</sub> Y <sub>6</sub> )
	куб + октаэдр + кубооктаэдр
	(C + O + CO) <sub>2c</sub> – <8 + 6 + 12 + 1, 12 + 12 + 24, 6 + 8 + 14> (O <sub>h</sub> ) (AX <sub>8</sub> Y <sub>6</sub> Z <sub>12</sub> )
	гексагональная призма Hp <sub>{4}</sub> – <12 + 4, 22, 9> (C <sub>2v</sub> ) ((A <sub>4</sub> X <sub>12</sub> ))
	дитетрагональная призма diTetr – <8 + 8, 12 + 12, 10> (C <sub>4v</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>8</sub> )
	три тетрагональных антипризмы 3Tetr – <4 + 8 + 4, 32, 26> (D <sub>4h</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>8</sub> )
	куб + усеченный куб (C + tC) <8 + 24, 12 + 36, 6 + 14> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>24</sub> )
	куб + кубооктаэдр (C + CO) <8 + 12, 12 + 24, 6 + 14> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>12</sub> )
	куб + усеченный октаэдр (C + tO) <8 + 24, 12 + 36, 6 + 14> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>24</sub> )
куб + октаэдр (C + O) <8 + 6, 12 + 12, 6 + 8> (O <sub>h</sub> ) (A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>6</sub> )	

Таблица 2

Дельтаэдрические ячейки-модули, полученные из гиперкуба 4D пространства

Число вершин дельтаэдра	Состав и символическое обозначение дельтаэдра	Гиперкомплексы, инициирующие дельтаэдры	Возможное координационное число каркасного атома углерода, (1 + k)
6	AX <sub>6</sub> (O <sub>c</sub> )	S <sub>T</sub> , S <sub>C</sub> , S <sub>O</sub> , HC	5
8	AX <sub>6</sub> Y <sub>2</sub> (Tap <sub>bc</sub> ), AX <sub>4</sub> Y <sub>4</sub> (diT <sub>c</sub> )	S <sub>T</sub> , S <sub>Hp</sub> , HO,	5, 6
	AX <sub>8</sub> (HbiPyr) <sub>c</sub> , AX <sub>6</sub> Y <sub>2</sub> (HbiPyr) <sub>c</sub>	HC, HT	6, 8
14	A <sub>0</sub> X <sub>8</sub> Y <sub>6</sub> (C + O),	HC, HO,	5, 7
	AX <sub>8</sub> Y <sub>6</sub> (C + O) <sub>c</sub>	S <sub>T</sub> , S <sub>C</sub> , S <sub>O</sub> , HC, HO	6, 8

Показана формальная возможность одновременной реализации двух разных гиперкоординаций углерода, в частности: (1 + k) = 6 и 8 для дельтаэдра (HbiPyr)<sub>c</sub> и для дельтаэдрического комплекса (C + O)<sub>c</sub>, (1 + k) = 5 и 7 для дельтаэдрического комплекса (C + O). Качественно это результат не противоречит известным экспериментально установленным данным, в частности для клозо-карборана 1,6-C<sub>2</sub>B<sub>8</sub>H<sub>10</sub> и металлакарборана C<sub>2</sub>B<sub>7</sub>H<sub>9</sub>CoCr (дельтаэдры в форме двухшапочной квадратной антипризмы, (1 + k) = 5

и 6) [2, 3, 14]. Некоторые центрированные полиэдры также могут содержать гиперкоординированный атом углерода, занимающий центральную позицию. В частности, это реализуется в карбидокарбонильных металлических кластерах: Ru<sub>6</sub>(CO)<sub>17</sub>C, Fe<sub>5</sub>M(CO)<sub>16</sub>C (где M – Ni, Pd, Pt) и Fe<sub>4</sub>M<sub>2</sub>(CO)<sub>14</sub>C (где M – Mo, Ni) в виде центрированного октаэдра O<sub>c</sub>, [M<sub>6</sub>(CO)<sub>15</sub>C]<sup>2-</sup> (где M – Co, Rh), и [Co<sub>2</sub>Rh<sub>4</sub>(CO)<sub>15</sub>C]<sup>2-</sup> в виде центрированной тригонпризмы Tr<sub>c</sub>, [Ni<sub>8</sub>(CO)<sub>16</sub>C]<sup>2-</sup> в виде центрированной тетрагональной антипризмы Tetra<sub>c</sub> [2].

**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. Ола Дж., Пракаш Г.К.С., Уильямс Р.Е., Филд Л.Д., Уэйд К. Химия гиперкоординированного углерода: пер. с англ.; под ред. В.И. Минкина. – М.: Мир, 1990. – 336 с.
3. Минкин В.И., Миняев Р.М., Хоффманн Р. Неклассические структуры органических соединений: нестандартная кристаллохимия и гиперкоординация // Успехи химии. – 2002. – Т.71. – № 11. – С. 989–1011.
4. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987. – 276 с.
5. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.
6. 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.
7. Крипякевич П.И. Структурные типы интерметаллических соединений. – М.: Наука, 1977. – 290 с.
8. 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. 2. – 696 с.; Т. 3. – 564 с.
9. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.
10. Иванов В.В., Таланов В.М. Принцип модулярного строения кристаллов // Кристаллография. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 385–398.
11. Иванов В.В., Таланов В.М. Алгоритм выбора структурного модуля и модулярный дизайн кристаллов // Журнал неорганической химии. – 2010. – Т. 55, № 6. С. 980–990.
12. Иванов В.В., Таланов В.М. Разбиение и структурирование пространства, описание процесса формирования модульного кристалла // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 8. – С. 75–77.
13. Иванов В.В., Таланов В.М. Формирование структурного модуля для модулярного дизайна в 3D-пространстве // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 9. – С. 74–77.
14. Грибанова Т.Н., Миняев Р.М., Минкин В.И. Неклассические системы с двумя гиперкоординированными атомами в полиэдрическом каркасе // Доклады Академии наук. – 2008. – Т. 418. – № 2. – С. 198–202.