УДК 548.1

СИМВОЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГИПЕРПОЛИЭДРОВ И ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИХ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ОБРАЗОВ В 3D-ПРОСТРАНСТВЕ

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 клеточных комплексов 4D-пространства, символьное описание гиперполиэдров и преобразования их геометрических образов в 3D-пространстве.

Ключевые слова: модулярная ячейка, клеточный комплекс, гиперполиэдр, топологические преобразования, координационный полиэдр

SYMBOLIC PRESENTATIONS OF HYPERPOLYHEDRA AND TRANSFORMATIONS OF ITS GEOMETRIC IMAGES INTO 3D 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 some other cellular complexes of the 4D-space, the symbolic description of hyper-polyhedra and the possible transformations of its geometric images into 3D-space were discussed.

Keywords: modular cell, cellular complex, hyper-polyhedron, topologic transformation, coordination polyhedron

Проблемы формирования модульных структур кристаллов, интерпретации и классификации структур, содержащих 0-мерные модули определенных структурных типов кристаллов, являются актуальными для структурной химии неорганических и органических веществ [1, 2]. В связи с этим разработка новых способов их вывода для целенаправленного модулярного дизайна структур с наперед заданными свойствами также являются значимыми для кристаллохимии неорганических веществ и стереохимии органических соединений.

Наряду с пятью хорошо известными правильными изогонами 3D-пространства (т.е. все изоэдры или тела Платона – тетраэдр, куб, октаэдр, додекаэдр и икосаэдр) в 4D-пространстве существуют семь правильных политопов (симплекс, гипероктаэдр, гиперкуб, гипертетраэдр, 24-, 120- и 600-ячеечники) [1, 2]. Проанализируем возможные варианты их топологических преобразований и геометрической реализации в 3D-пространстве. Обоснованием для формальной возможности подобного анализа является гипотеза о вероятном проявлении топологических свойств определенных локальных структурных фрагментов гиперпространства (в частности, 4D-пространства) и влиянии на геометрико-топологические характеристики их некоторых проективных 3D-образов. При этом предполагается, что некоторые пространственные ячейки, в которые вложены эти структурные фрагменты, представляют собой ячейки-модули определенного множества модулярных структур и подчиняются модулярному закону [1, 3–5]. Данный анализ вызван также необходимостью интерпретации нестандартных конфигураций и гиперкоординации некоторых атомов, в частности атомов углерода, в органических и металлорганических молекулярных кристаллах [6, 7], особенностей координации атомов металла в кристаллических структурах разупорядоченных сплавов, некоторых интерметаллидов [8, 9], металлических и металлорганических нанокластерах [10, 11].

Каждый из политопов после проецирования на 3D-пространство и соответствующих топологических преобразований полученных геометрических образов может породить набор нестандартных вершинных конфигураций, изоморфных набору вероятных модулярных ячеек. Эти ячейки могут содержать структурные модули, описывающие особенности ближнего порядка в структурах кристаллов, в частности, некоторые конфигурационные особенности фрагментов модулярных структур, гиперкоординированные атомы в молекулах и кластерах – структурных элементов неорганических и органических соединений [6, 7, 12, 13].

При описании топологических преобразований гиперячеек использовали два информационно эквивалентных и взаимосвязанных вида символьных представлений гиперполиэдров – многоячеечников (политопов):

$$HPh – N_v <1, n_e, n_f, n_{ph}> \{n_{ph}\ ph_i\}$$

и

$$HPh – <N_v, N_e, N_f, N_{ph}> \{N_{ph}\ ph_i\}.$$

Оба символьных представления гиперполиэдра содержат информацию о его наименовании (HPh), количестве вершин (v), ребер (e), граней (f), а также количестве и типе ячеек-полиэдров (ph). Однако первое представление характеризует в большей степени вершинную топологию гиперполиэдра, чем его общий состав, и является эффективным только для правильных политопов. Для перехода от первого представления правильного политопа ко второму можно воспользоваться формулами $N_{e(f, ph)} = k_d N_v n_{e(f, ph)}$, в которых коэффициент перехода

$$k_d = \begin{cases} (d+1)^{-1} \\ 2^{-d} \end{cases} \text{для} \quad \begin{matrix} \{3\} - \text{граней} \\ \{4\} - \text{граней} \end{matrix}$$

соответственно, а параметр мерности структурного элемента d = 0(v), 1(e), 2(f), 3(ph).

Примеры:

$$\text{симплекс} – S\text{-}5 <1, 4, 6, 4> \{T^4\}$$

и

$$S <5, 10, 10, 5> \{T^5\},$$

$$\text{гиперкуб} – HC\text{-}16 <1, 4, 6, 4> \{C^4\}$$

и

$$HC <16, 32, 24, 8> \{C^8\},$$

$$\text{гипертетраэдр (16-ячеечник)} – HT\text{-}8 <1, 6, 12, 8> \{T^8\}$$

и

$$HT <8, 24, 32, 16> \{T^{16}\}.$$

В случае неправильных политопов символьное описание по первому варианту включает описания всех топологически различных вершин и выглядит достаточно сложным, поэтому необходимо использовать второй вариант описания, например:

$$\text{тригональная гиперпризма } HTp <12, 24, 16, 7> \{Tp^4C^3\},$$

$$\text{гипероктаэдр (10-ячеечник) } HO <12, 30, 28, 10> \{O^2Tp^8\}.$$

Для получения новых топологических типов сеток используют разные способы генерации [14, 15]. Одним из этих способов является декорирование (замена узлов исходной сетки на кластеры) или сплиттинг-преобразование вершин полиэдров, построенных на узлах сетки. Частными случаями декорирования являются аугментация, когда форма кластера совпадает с формой координационного полиэдра узла, и расширение, при котором ребро исходной сетки заменяется цепочками ребер. Стеллейшн-преобразование граней полиэдра можно рассматривать как дуальное топологическое преобразование по отношению к сплиттинг-преобразованию вершин. С этими двумя преобразованиями тесно связано представление о дуальных по отношению друг к другу взаимопроникающих сетках и соответствующим ему преобразованием прямого перехода от образов фрагмента модулярной ячейки к дуальным образам фрагмента в виде полиэдров Вороного-Дирихле.

Будем считать, что образующиеся при проецировании гиперячейки геометрические образы являются фрагментами трехмерных трижды периодических сеток или двух таких же взаимопроникающих сеток. Образование подобных взаимопроникающих сеток возможно за счет валентных или водородных связей в структурах органических, неорганических соединений и координационных полимеров. Фрагменты этих унинодальных (в случае прообраза в виде правильного политопа) или бинодальных сеток (когда прообраз – неправильный политоп) обуславливают соответствующие координационные последовательности и могут быть представлены в виде совокупности двух и более полиэдров с одним общим геометрическим центром [15].

Поскольку проецируемые геометрические образы гиперячеек состоят из внешних узлов (оболочки) и внутренних узлов, то формально возможно два варианта их топологических преобразований. В одном варианте топологическим преобразованиям подвергаются все узлы геометрического образа. Это эквивалентно утверждению о том, что все узлы геометрического образа принадлежат унинодальной сетке, а результаты ее топологических преобразований – структурные фрагменты образуют ряд генетически взаимосвязанных модулярных ячеек, изоморфный соответствующему ряду их вероятных прообразов – гиперячеек. Во втором варианте – преобразуются только узлы, составляющие оболочку, а конфигурация внутренних узлов остается неизменной. В этом случае предполагается, что точки геометрического образа – фрагменты бинодальной сетки. Структурные фрагменты, образующиеся в результате топологических преобразований одной из них (составляющих оболочку), также образуют ряд генетически взаимосвязанных модулярных ячеек, но с единым прообразом – инициальной гиперячейкой. Для получения геометрических образов модулярных ячеек из гиперячеек будем использовать второй вариант.

Для каждой гиперячейки можно воспользоваться следующими топологическими преобразованиями оболочек их наиболее симметричных проекций в 3D-пространстве.

1. Сплиттинг-преобразования вершин гиперячейки. Суть преобразования заключается в расщеплении по определенному закону вершин гиперячейки, принадлежащих ее оболочке. Преобразование сопровождается изменением конфигурации оболочки гиперячейки, изменениями числа ребер, количества и формы граней и ячеек. Пример:

гипертетраэдр HT <8, 24, 32, 16> $\{T^{16}\}$ →

лавесовский тетраэдр $L'T_{(T)}$– <16, 36, 36, 16> $\{L'T\ Hpyr^4\ O^4\ T^7\}$ →

октаэдр $O_{(T)}$- <10, 42, 36, 10> $\{O^5\ T^5\}$.

2. Стелейшн-дизайн внешних граней гиперячейки. Преобразование внешних граней гиперячейки связано с их наращиванием до превращения в вершины новой ячейки.

Пример 1 (стелейшн-дизайн половины граней оболочки HO):

гипероктаэдр (10-ячеечник) HO <12, 30, 28, 10> $\{O^2Tp^8\}$ →

лавесовский тетраэдр $L'T_{(O)}$– <18, 42, 34, 10> $\{L'T\ O\ Tp^4\ ½KO^4\}$ →

тетраэдр $T_{(O)}$– <10, 30, 24, 10> $\{T^5O^5\}$.

Пример 2 (стелейшн-дизайн всех граней оболочки HO):

гипероктаэдр (10-ячеечник) HO <12, 30, 28, 10> $\{O^2Tp^8\}$ →

усеченный октаэдр $tO_{(O)}$ <24, 72, 54, 16> $\{tO\ O\ Tetpyr^6\ ½CO^8\}$ →

кубооктаэдр $CO_{(O)}$ <18, 60, 46, 16> $\{CO\ O\ Tetpyr^6\ O^8\}$ →

усеченный куб $tC_{(O)}$ <30, 96, 70, 24> $\{tC\ C\ Octpyr^6\ O^8T^8\}$ →

куб $C_{(O)}$ <14, 48, 62, 28> $\{C\ O\ Tetpyr^6\ T^{20}\}$.

3. Стретч-оупен-дизайн гиперячейки. Преобразование открытия гиперячейки, сопровождающееся вытягиванием внутренних вершин наружу через одну из граней оболочки.

Пример для одного из правильных политопов – тетраэдрического симплекса:

Симплекс S_T- <5, 10, 10, 5> $\{T^5\}$ →

Симплекс с центрированной гранью $S_{\{3\}f}$- <5, 10, 7, 4> $\{T_{bc}\}$ →

Тригональная бипирамида $T_{\{3\}bipyr}$- <5, 9, 7, 2> $\{T^2\}$.

4. Преобразование Вороного-Дирихле. Преобразование геометрического образа гиперячейки в дуальный ему образ за счет превращения геометрических центров ячеек в вершины, а граней – в ребра [12].

Примеры:

Гиперкуб HC- < 16, 32, 24, 8 > $\{C^8\}$ →

дважды центрированный октаэдр O_{2c}- < 6 + 2, 12, 8 > ,

Гипертетраэдр HT- <8, 24, 32, 16> $\{T^{16}\}$ →

дважды центрированный дитетраэдр + октаэдр $(diT + O)_{2c}$- <4 + 4 + 6 + 2,6 + 6 + 12,4 + 4 + 8> .

Для перехода от совокупности геометрических образов, соответствующих в 3D-пространстве анализируемой гиперячейке, к гомеоморфной совокупности вероятных модулярных ячеек необходимо учитывать условия, которым эти ячейки должны удовлетворять [4, 5]. Под модулярной ячейкой будем понимать пространственную ячейку, содержащую структурно совместимый с ней неизолированный асимметричный модуль с определенными конфигурационными и топологическими характеристиками. Данная ячейка может рассматриваться как инициальная для получения некоторого множества модулярных структур, генетически связанных между собой общим структурным модулем. Модулярные структуры из этого множества отличаются друг от друга ориентационным и позиционным упорядочением структурного модуля в 2D- или 3D-пространстве [16–23].

Таким образом, геометрические образы фрагментов модулярных ячеек в 3D-пространстве, полученные в результате описанных выше целенаправленных преобразований симметричных проекций гиперячеек, могут содержать те дополнительные конфигурационные элементы, которые определяют их нестандартность по отношению к общеизвестным координационным полиэдрам. В частности, простейшие вероятные фрагменты модулярных ячеек описывают ближний порядок атомов в эквивалентных кристаллографических позициях, а не возможную трансформацию координационного полиэдра типа AX_4. В подавляющем большинстве случаев полиэдры с координационными числами, не превышающими 12, хорошо известны [8–10, 13] и давно используются при кристаллохимическом описании структур неорганических и металлорганических соединений.

Список литературы

1. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. Новая геометрия для новых материалов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 264 с.

2. Стюарт Я. Концепции современной математики. / Пер. с англ. Н.И. Плужниковой и Г.М. Цукерман – Минск: Выш. школа, 1980. – 384 с.

3. Ferraris G., Makovicky E., Merlino S. Crystallography of modular structures // IUC Oxford Science Publications. – 2008. – 370 p.

4. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 8. – С. 75–77.

5. Иванов В.В., Таланов В.М. // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 9. – С. 74–77.

6. Ола Дж., Пракаш Г.К.С., Уильямс Р.Е., Филд Л.Д., Уэйд К. Химия гиперкоординированного углерода. – М.: Мир, 1990. – 336 с.

7. Минкин В.И., Миняев Р.М., Хоффманн Р. // Успехи химии. – 2002. – Т.71. – № 11. – С. 989–1011.

8. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. – М.: Мир, 1977. – Ч.1. – 420 с.; Ч. 2. – 472 с.

9. Крипякевич П.И. Структурные типы интерметаллических соединений. – М.: Наука, 1977. 290 с.

10. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия: концепции и перспективы. – Новосибирск: Наука, 1998. – 334 с.

11. Илюшин Г.Д., Блатов В.А. // Журнал неорганической химии. – 2010. – Т. 55, № 12. – С. 2023–2032.

12. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987. – 276 с.

13. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. В 3-х томах. – М.: Мир, 1987/88. – Т.1. – 408 с.; Т.2. – 696 с.; Т.3. – 564 с.

14. Wells A.F. Three-dimensional nets and polyhedra – N.Y.: Wiley-Interscience, 1977.

15. Блатов В.А. // Журнал структурной химии. – 2009. – Т.50. – С. 166–173.

16. Иванов В.В. Комбинаторное моделирование вероятных структур неорганических веществ. – Ростов-на-Дону: Изд-во СКНЦ ВШ, 2003. – 204 с.

17. Иванов В.В., Таланов В.М. // Кристаллография. – 2010. – Т. 55, № 3. – С. 385–398.

18. Иванов В.В., Таланов В.М. // Журнал неорганической химии. – 2010. – Т.55, № 6. – С. 980–990.

19. Иванов В.В., Таланов В.М. // Физика и химия стекла. – 2008. – Т. 34, № 4. – С. 528–567.

20. Иванов В.В., Таланов В.М. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2010. – Т.1, № 1. – С. 72–107.

21. Иванов В.В., Таланов В.М., Гусаров В.В. // Наносистемы: Физика, Химия, Математика. – 2011. – Т.2, № 3. – С. 121–134.

22. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М., Попов В.П. // Успехи современного естествознания. – 2012. – № 2. – С. 60–63.

23. Иванов В.В., Шабельская Н.П., Таланов В.М. // Современные наукоемкие технологии. – 2010. – № 10. – С. 176–179.