

Владимирский государственный университет

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ
И РОДСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ**

**Материалы всероссийской конференции
с международным участием
памяти д.ф.-м.н. А. В. Малеева
14 – 15 декабря 2022 г.**

Владимир 2023

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И РОДСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ

Материалы всероссийской конференции
с международным участием
памяти д.ф.-м.н. А. В. Малеева
14 – 15 декабря 2022 г.

Электронное издание



Владимир 2023

ISBN 978-5-9984-1720-7

© ВлГУ, 2023

© Коллектив авторов, 2023

УДК 548.1
ББК 22.37

Редакционная коллегия:

Мокрова А. А., к.ф.-м.н.

доцент кафедры физико-математического образования
и информационных технологий (*отв. редактор*)

Тихомиров Р. Н., к.ф.-м.н., доцент

доцент кафедры физико-математического образования
и информационных технологий (*зам. отв. редактора*)

Издается по решению редакционно-издательского совета ВлГУ

Математическая кристаллография и родственные задачи [Электронный ресурс] : материалы всерос. конф. с междунар. участием. 14 – 15 дек. 2022 г. / Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых. – Владимир : Изд-во ВлГУ, 2023. – 64 с. – ISBN 978-5-9984-1720-7. – Электрон. дан. (2,07 Мб). – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). – Систем. требования: Intel от 1,3 ГГц ; Windows XP/7/8/10 ; Adobe Reader ; дисковод CD-ROM. – Загл. с титул. экрана.

Представлены материалы всероссийской конференции с международным участием «Математическая кристаллография и родственные задачи» памяти д.ф.-м.н. Андрея Владимировича Малеева. Конференция проводилась на базе кафедры физико-математического образования и информационных технологий ВлГУ. Материалы содержат информацию о современных достижениях в области математической кристаллографии и связанных с ней научных областях.

Предназначены для научных сотрудников, преподавателей, аспирантов и студентов.

ISBN 978-5-9984-1720-7

© ВлГУ, 2023

© Коллектив авторов, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

К читателю.....	5
 <i>Банару А.М.</i>	
Молекулярные сети с единственным опорным контактом в кристалле	6
<i>Банару Д.А., Аксенов С.М.</i>	
Структурная сложность гетеродесмических кристаллических структур на примере эвдиалита	8
<i>Бужина А.С., Мокрова А.А.</i>	
Построение множеств ограниченного остатка на основе перекладывающегося квадрата	11
<i>Геворгян А.А.</i>	
nWC-дополненные WC-Co твердые сплавы и Al-/Zr-оксидные композиты	15
<i>Мокрова А.А., Журавлев В.Г.</i>	
Перекладывающиеся полимино с симметриями	17
<i>Олешко В.С.</i>	
Кристаллографическая анизотропия работы выхода электрона металлов	22
<i>Потехин К.А., Серавкин К.Г.</i>	
Решетчатые и изоэдральные разбиения плоскости на два одинаковой формы гептамино	25
<i>Потехин К.А.</i>	
Двойной двухсторонний захват в молекулярных кристаллах и в разбиениях плоскости на полимино.....	29
<i>Серавкин К.Г., Потехин К.А.</i>	
Координационные последовательности и предельные многоугольники роста трансляционных квадратных разбиений плоскости на два конгруэнтных гептамино	32
<i>Скворцов К.В.</i>	
Метод моделирования наноструктур	36

Сомов Н.В., Чупрунов Е.В.	
Структурные дескрипторы для решения фундаментальных и прикладных задач кристаллографии	38
Степенищikov Д.Г., Аксенов С.М.	
Комбинаторные типы фуллеренов C_{20} - C_{60} с 4-членными циклами	42
Суворова Д.А.	
Полиморфизм разбиений плоскости на два пентамино одинаковой формы (научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. кафедры ФМОиИТ К.А. Потехин)	46
Талис А.Л.	
Некристаллографические симметрии, определяющие самосборку структур (био)полимеров, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров	49
Чаюн К.Ю.	
Решетчатые и изоэдральные разбиения плоскости на два гексамино (научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. кафедры ФМОиИТ К.А. Потехин)	51
Шутов А.В.	
Модель послойного роста: история, результаты, открытые проблемы	55
Hilgers P.	
Growth processes in grid tilings.....	59

К читателю

Издание включает материалы всероссийской конференции с международным участием, которая была посвящена памяти Андрея Владимировича Малеева, доктора физико-математических наук, доцента заведующего кафедрой общей и теоретической физики Педагогического института Владимирского государственного университета.

В работе конференции приняли участие коллеги Андрея Владимировича из ВлГУ (В.А. Игонин, А.А. Мокрова, А.В. Шутов, В.Г. Журавлев, К.А. Потехин) и ученые из Германии (Peter Hilgers), Словакии (Gevorkyan A.S.), Москвы (А.Л. Талис, А.М. Банару, Д.А. Банару и В.С. Олешко), Нижнего Новгорода (Н.Н. Сомов и Е.В. Чупрунов) и Апатитов (Д.Г. Степенчиков и С.М. Аксенов). Кроме того, в работе конференции приняли участие молодые ученые, аспиранты и студенты ВлГУ (К.В. Скворцов, К.Г. Серавкин, А.С. Бужина, К.Ю. Чаюн и Д.А. Суворова).

В «зону научных интересов» Андрея Владимировича входили такие направления, как исследование и описание кристаллической структуры молекулярных кристаллов, исследование межмолекулярного взаимодействия в кристаллах, некристаллографической симметрии фрагментов кристаллических структур, описание геометрического строения квазикристаллов и возможности их математического моделирования, исследование разбиений плоскости на замкнутые области (в том числе на полимино). Именно анализу этих вопросов на современном этапе развития кристаллографии и кристаллохимии и были посвящены доклады участников конференции.

Надеемся, что представленные материалы будут интересны как профессиональным кристаллографам и кристаллохимикам, так и аспирантам, магистрантам и студентам.

*Председатель программного комитета конференции
К.А. Потехин, д.ф.-м.н., профессор
профессор кафедры физико-математического
образования и информационных технологий ВлГУ*

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ СЕТИ С ЕДИНСТВЕННЫМ ОПОРНЫМ КОНТАКТОМ В КРИСТАЛЛЕ

А.М. Банару^{1,2}

¹*Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова*

²*Кольский научный центр РАН*

banaru@phys.chem.msu.ru

Аннотация. Обсуждаются структурные классы (СК) молекулярных кристаллов, которые могут быть построены за счет одного опорного межмолекулярного контакта. Рассматриваются примеры и приводится статистика таких СК по Кембриджскому банку структурных данных.

Ключевые слова. Межмолекулярный контакт, структурный класс, молекулярная сеть, потенциальная энергия взаимодействия.

Термин "контакт" в кристаллохимии обычно используется в двух значениях: 1) группы атомов или отдельные атомы разных молекул, находящиеся на коротком расстоянии друг от друга; 2) пара соседних молекул. Среди контактов (и в одном, и в другом смысле) существует особая разновидность – *опорные*, или *структурообразующие* контакты, которые могут сохраняться при некоторых фазовых переходах. Опорным контактам часто отвечают устойчивые супрамолекулярные синтоны, однако в общем случае набор опорных контактов является нечетким и может быть выбран в кристаллической структуре разными способами. В первую очередь, в этот набор должны быть включены контакты: а) вносящие наибольший вклад в потенциальную энергию кристалла; б) наиболее устойчивые к разрыву. Для поиска опорных контактов используют несколько критериев. А.В. Малеев и соавт. использовал критерий жесткости (по П.М. Зоркому), в котором жесткость контакта убывает с ростом среднеквадратичного отклонения координат соответствующих атомов у пар молекул до и после оптимизации потенциальной энергии их взаимодействия [1]. Еще один критерий, введенный А.В. Малеевым и соавт., учитывает число межатомных контактов вблизи точки минимума потенциальной кривой $\varphi(r)$, таких что $r_L \leq r \leq r_W$, где r_W – координата точки перегиба, и $\varphi(r_L) = \varphi(r_W)$ (PWC), а также число межатомных контактов, у которых $\varphi > 0$ (PC) [2]. Данитц и

Гавецотти для поиска наиболее устойчивых супрамолекулярных синтонов тоже исследовали потенциальную кривую межатомного взаимодействия, рассчитывая по ней индекс ангармоничности контакта [3]. В качестве альтернативы для выявления опорных контактов можно использовать анализ молекулярных поверхностей Хиршфельда [4] или молекулярных полиэдров Вороного–Дирихле [5].

Чтобы породить молекулярную кристаллическую структуру, в каждом структурном классе (СК) вида G_m^n , $Z = k(\cup_{i=1}^{Z''} G_{0,i}^n)$, где G_m^n – n -мерная пространственная группа, периодическая в $m \leq n$ измерениях, $G_{0,i}^n$ – n -мерная точечная группа симметрии (стабилизатор) позиции молекул, занимающих i -ю орбиту, Z'' – число занятых молекулами орбит, достаточно конечного числа $\text{inf}(\text{CN}'_{\text{crit}})$ симметрически уникальных опорных контактов:

$$\text{inf}(\text{CN}'_{\text{crit}}) = |U(G_m^n)| + Z'' - 1 - |U(\langle \cup_{i=1}^{Z''} G_{0,i}^n \rangle)|,$$

где $|U(\langle \cup_{i=1}^{Z''} G_{0,i}^n \rangle)|$ – мощность минимального порождающего подмножества группы $\langle \cup_{i=1}^{Z''} G_{0,i}^n \rangle$, порождаемой совокупностью элементов $\cup_{i=1}^{Z''} G_{0,i}^n$, и $|U(G_m^n)|$ – мощность минимального порождающего подмножества исходной группы G_m^n .

Особый интерес представляют трехмерные кристаллы, у которых опорный контакт может быть единственным, т.е. $\text{inf}(\text{CN}'_{\text{crit}}) = 1$ [6]. Всего выведено 160 моносистемных ($Z'' = 1$) и 244 бисистемных ($Z'' = 2$) СК, из которых самыми распространенными являются $Fdd2$, $Z = 8(2)$ (СК DMSO₄) и $P4_12_12$, $Z = 4(2)$ (СК PhCN) (по ~0.16% структур Кембриджского банка данных) [7]. Молекулярная сеть, построенная на единственном опорном контакте, в этих СК относится к алмазному типу **dia**, однако в других СК могут встречаться молекулярные сети другого типа, например **pcu** (простая кубическая кладка), **bcu** (ОЦК-кладка), **qtz** (α - и β -кварц), **sod** (содалит) и другие.

Список использованной литературы

1. Maleev A. V., Sedov, B. B., Zhitkov, I. K., Rau V. G. Examination of Stability of Molecular Agglomerates in Molecular Crystals // J. Struct. Chem. 2007. V. 48. P. 150–154.
2. Maleev A. V., Gevorgyan A. A., Potekhin K. A. New Approach to the Analysis of Molecular Packings in Crystals with the Use of Atom-Atom Potentials // J. Struct. Chem. 2018. V. 59. P. 455–462.

3. Dunitz J. D., Gavezzotti A. Supramolecular Synthons: Validation and Ranking of Intermolecular Interaction Energies // Cryst. Growth Des. 2012. V. 12. P. 5873–5877.
4. Spackman M. A., Jayatilaka D. Hirshfeld Surface Analysis // CrystEngComm. 2009. V. 11. P. 19–32.
5. Blatov V. A. Voronoi-Dirichlet Polyhedra in Crystal Chemistry: Theory and Applications // Crystallogr. Rev. 2004. V. 10. P. 249–318.
6. Banaru A. M., Banaru D. A., Aksenov S. M. Structural Classes of Molecular Crystals with a Sole Bearing Contact // J. Struct. Chem. 2022. V. 63. P. 260–271.
7. Banaru A. M., Bond A. D., Aksenov S. M., Banaru D. A. Molecular Crystals with a Sole Bearing Contact: Structural Classes and Statistical Data // Z. Krist. 2022. V. 237. P. 271–279.

СТРУКТУРНАЯ СЛОЖНОСТЬ ГЕТЕРОДЕСМИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ПРИМЕРЕ ЭВДИАЛИТА

Д.А. Банару¹, С.М. Аксенов²

¹*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН*

²*Кольский научный центр РАН*

banaru@geokhi.ru

Аннотация. Разработана схема лестничного расчета структурной сложности гетеродесмических кристаллических структур при любой размерности основного структурного мотива. Координация 0D- и 1D-мотивов, необходимая для расчета сложности контактов вне основного мотива, устанавливается методом полиэдров Вороного-Дирихле. На последней ступени лестничного расчета структурная сложность основного мотива складывается со сложностью контактов вне основного мотива в соответствии с правилом сильной аддитивности.

Ключевые слова. Координационное число, комбинаторная сложность, сильная аддитивность, информация по Шэннону, эвдиалит.

Сложность какого-либо объекта имеет три разновидности [1]: i) сложность описания (сложность по Шэннону, Реньи, Лемпелю-Зиву и т.д.),

ii) сложность создания (временная сложность алгоритма, вычислительная сложность, глубина сложности по Беннетту и др.), iii) степень организации (стохастическая сложность, иерархическая сложность, топологический размер машинного эпсилон и проч.).

С.В. Кривовичев впервые использовал сложность по Шэннону для расчета количества структурной информации, приходящейся в кристалле на один атом (бит/атом) [2], с помощью функционала вида:

$$H = \sum_{i=1}^k L(p_i),$$

$$L(p_i) = \begin{cases} 0 & (p_i = 0), \\ -p_i \log_2 p_i & (p_i > 0) \end{cases},$$

где p_i рассчитывается как вероятность того, что наугад выбранный атом в кристаллической структуре принадлежит i -й кристаллографической орбите. На примере структур минералов, содержащих батагоитовые слои $[M(ТO_4)\phi]$, где $M = Fe, Mg, Mn, Ni, Zn, Co$; $T = P, As$; $\phi = OH, H_2O$, была предложена лестница информации [3], в качестве ступеней которой были выбраны: 1) топологическая сложность индивидуального слоя идеализированной симметрии; 2) сложность индивидуального слоя неидеализированной (наблюдаемой) симметрии; 3) сложность взаимной упаковки слоев; 4) сложность структуры межслоевых промежутков, включая атомы H; 5) сложность сети H-связей. Лестничные диаграммы помогают выявить основную причину сложности кристаллической структуры.

Hornfeck [4] расширил понятие сложности кристаллической структуры, предложив складывать структурную информацию от нескольких источников по правилу сильной аддитивности. К произвольным гетеродесмическим кристаллическим структурам это правило можно применить следующим образом. Пусть кристалл содержит U'' симметрически независимых структурных единиц (b.u.), тогда структурная сложность j -й структурной единицы, периодичной в $\dim(j)$ измерениях, равна

$$H_{b.u.,j}^{\dim(j)} = - \sum_{i=1}^{v_j''} \frac{v_{ij}}{v_j} \cdot \log_2 \frac{v_{ij}}{v_j},$$

где v_j – число атомов, входящих в состав единиц j -го типа, в расчете на приведенную элементарную ячейку всего кристалла; v_{ij} – число атомов, входящих в состав единиц j -го типа и занимающих i -ю кристаллографическую орбиту; v_j'' – общее число орбит, занятых атомами,

входящими в состав единиц j -го типа. Комбинаторная сложность $H_{\text{b.u.}}$ гетеродесмической кристаллической структуры равна

$$H_{\text{b.u.}} = \sum_{j=1}^{U''} \frac{v_j}{\sum_j v_j} H_{\text{b.u.},j}^{\text{dim}(j)} + H_{U''},$$

$$H_{U''} = H(v_1, v_2, \dots, v_{U''}),$$

$$H_{\text{b.u.},\text{Net}} = H(v, e) + \frac{v}{v+e} H_{\text{b.u.}} + \frac{e}{v+e} H_{\text{edge}}^{\text{dim}},$$

где $H_{\text{edge}}^{\text{dim}}$ – комбинаторная сложность сети контактов между структурными единицами, которая имеет размерность dim . В случае, когда $v_1 = v_2 = \dots = v_{U''}$, $H_{U''} = \log_2 U''$. Величина $H_{U''}$ (бит/б.у.) представляет собой дополнительную прибавку к структурной сложности кристалла в результате сложения нескольких источников информации (структурных единиц). Для анализа топологии сетей при $\text{dim} > 1$ у конкретных кристаллических структур, например эвдиалита, в работе использовали программу ToposPro [5] с расширенной базой данных TTD.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № 13.1902.21.008, соглашение 075-15-2020-802).

Список использованной литературы

1. Lloyd S. Measures of Complexity: A Nonexhaustive List // IEEE Control Syst. Mag. 2001. V. 21. P. 7–8.
2. Krivovichev S. Topological Complexity of Crystal Structures: Quantitative Approach // Acta Cryst. A. 2012. V. 68, P. 393–398.
3. Krivovichev S. V. Ladders of Information: What Contributes to the Structural Complexity of Inorganic Crystals // Z. Krist. 2018. V. 233. P. 155–161.
4. Hornfeck W. On an Extension of Krivovichev's Complexity Measures // Acta Cryst. A. 2020. V. 76. P. 534–548.
5. Blatov V. A., Shevchenko A. P., Proserpio D. M. Applied Topological Analysis of Crystal Structures with the Program Package ToposPro // Cryst. Growth Des. 2014. V. 14. P. 3576–3586.

ПОСТРОЕНИЕ МНОЖЕСТВ ОГРАНИЧЕННОГО ОСТАТКА НА ОСНОВЕ ПЕРЕКЛАДЫВАЮЩЕГОСЯ КВАДРАТА

А.С. Бужина¹, А.А. Мокрова²

¹аспирант кафедры ФМОиИТ ПИ ВлГУ

²к.ф.-м.н., доцент кафедры ФМОиИТ ПИ ВлГУ

rina_20123@mail.ru

Аннотация. Рассматривается применение метода построения множеств ограниченного остатка (BR-множеств) на основе перекладывающихся торических разверток для двумерного случая. Описано построение BR-множеств на базе перекладывающегося квадрата, являющегося разверткой двумерного тора. Получены точные границы отклонений для построенных множеств.

Ключевые слова. Множества ограниченного остатка, перекладывающаяся торическая развертка, границы отклонений.

Изучение множеств ограниченного остатка и их многомерных динамических модификаций является актуальным в связи с современной тенденцией перехода от классических арифметических числовых и функциональных структур к нелинейным арифметическим структурам.

Сами BR-множества и порождаемые ими подмножества целых чисел – последовательности номеров итерации сдвига тора обладают многими свойствами, важными для приложений, в частности в математической кристаллографии они могут быть использованы для задания квазипериодических разбиений.

В одномерном случае первые примеры таких множеств были построены 1921 г. Э. Гекке. В двумерном случае первый пример BR-множеств был получен в 1954 г. R. Szűsz [1]. Это было семейство параметрических параллелограммов, для которых выполняется оценка $\delta(i) = O$.

Другой подход к построению множеств ограниченного остатка обнаружили математики французской школы Ж. Рози [2] и S. Ferenczi [3]. Они связали свойство быть BR-множеством со свойствами отображения первого возвращения. Но получить оценки остаточного члена в двумерном случае так и не удалось. В 2005 г. В. Г. Журавлев получил оценки для

фрактальных множеств ограниченного остатка, построенных на основе двумерного разбиения Розы [4].

В 2011 г. работе [5] В. Г. Журавлева был предложен обобщенный метод построения множеств ограниченного остатка на основе перекладывающихся торических разверток. В работе [5] с помощью гексагональных разверток тора были построены двумерные множества ограниченного остатка.

Пусть на двумерном торе $\mathbb{T} = \mathbb{R}/L^2$ задана орбита $Orb_{x_0}(\alpha)$ движения начальной точки $x_0 = (0, 0)$. Здесь L^2 — полная двумерная решетка над множеством действительных чисел \mathbb{R} , $\alpha \in \mathbb{R}$ — вектор сдвига S_α , порождающего орбиту $Orb_{x_0}(\alpha)$.

Зададим считающую функцию $r(i)$, определяющую количество точек орбиты $Orb_{x_0}(\alpha)$, попавших в некоторую область T_k на торе \mathbb{T} , то есть $r(i) = \#\{j: 0 \leq j < i, S_\alpha^j \in T\}$, где i — общее количество точек орбиты $Orb_{x_0}(\alpha)$. В случае иррационального вектора α сдвига S_α , точки орбиты $Orb_{x_0}(\alpha)$ всюду плотно и равномерно заполняют весь тор, и для $r(i)$ справедлива асимптотическая формула

$$r(i) = i Vol_{T_k} + \delta_k(i), \quad (1)$$

где Vol_{T_k} — площадь области T_k , а $\delta_k(i) = o(i)$ — остаточный член формулы (1) или отклонение считающей функции $r(i)$ от ожидаемой величины $i Vol_{T_k}$.

Если существует такая константа C_{T_k} , что для остаточного члена $\delta_k(i)$ справедливо неравенство $\delta_k(i) \leq C_{T_k}$, то множество T_k называется *множеством ограниченного остатка* или *BR-множеством* (bounded remainder set).

По методу Журавлева В.Г. мы строим двумерные множества ограниченного остатка, на основе развертки двухмерного тора \mathbb{T} , на базе единичного квадрата T с вершинами $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(1, 1)$, $(0, 1)$.

Разбиение квадрата задается с помощью векторов $(\alpha_1, 0)$, $(0, \alpha_2)$ отложенных на сторонах квадрата. На основе этих векторов построим разбиение квадрата T на области $T_k, k = 0, 1, 2$ (рис. 1), площади которых соответственно равны $Vol_{T_0} = 1 - \alpha_1$; $Vol_{T_1} = \alpha_1 \alpha_2$; $Vol_{T_2} = \alpha_1(1 - \alpha_2)$.

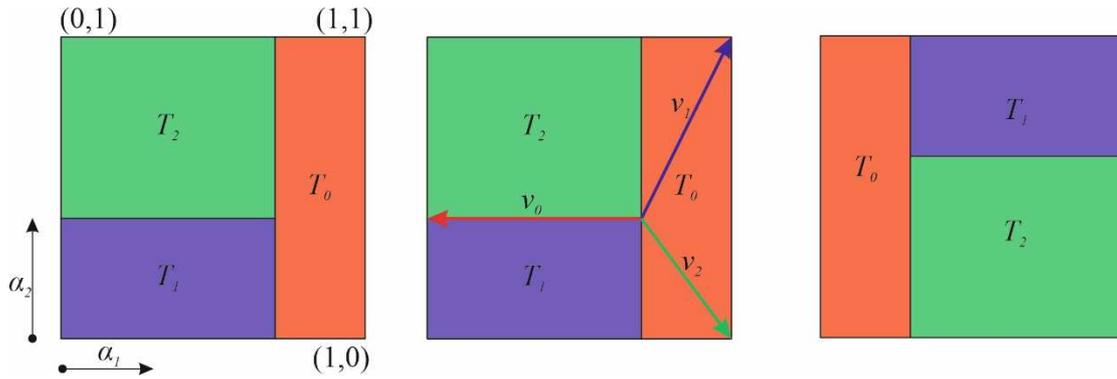


Рисунок 1.

Заметим, что полученные области перекладываются, результатом перекладывания будет так же квадрат T (рис. 1). Получим преобразование $S_v: T \rightarrow T: x \rightarrow S_v(x) = x + v_k$, где $x \in T_k$, а v_k – векторы перекладывания для областей $T_k, k = 0,1,2$, и они соответственно равны $v_0 = (-\alpha_1, 0), v_1 = (1 - \alpha_1, 1 - \alpha_2), v_2 = (1 - \alpha_1, -\alpha_2)$.

Определим базисные векторы l_1, l_2 решетки \mathbb{Z}^2 .

$$\begin{aligned} l_1 &= (1 - \alpha_1, 1 - \alpha_2) - (-\alpha_1, 0) = (1, 1 - \alpha_2), \\ l_2 &= (1 - \alpha_1, -\alpha_2) - (-\alpha_1, 0) = (1, -\alpha_2) \end{aligned} \quad (2)$$

В работе [4] Журавлева В.Г. показано, что отклонения для множеств $T_k, k = 0,1,2$ могут быть определены с помощью базиса двойственного к исходному (2) с помощью формулы $\delta_k = l_k^* \cdot \delta$, где $\delta = \sum_{0 \leq j < i} \Delta Fr(j\alpha)$ – суммарное векторное отклонение.

Векторы двойственного базиса соответственно равны $l_1^* = (\alpha_2, 1), l_2^* = (1 - \alpha_2, -1)$. Также для определения δ_0 введем вектор $\bar{l}_0^* = -\bar{l}_1^* - \bar{l}_2^* = (-1, 0)$.

Так как квадрат является компактным множеством, то для определения границ отклонений достаточно найти значения отклонений в вершинах квадрата (Таблица 1)

Координаты вершин x_n	$l_0^* \cdot x_n$	$l_1^* \cdot x_n$	$l_2^* \cdot x_n$
(0,0)	0	0	-
(0,1)	0	1	-1
(1,0)	-1	$\alpha_2 + 1$	$-\alpha_2$
(1,1)	-1	α_2	$1 - \alpha_2$

Таблица 1.

Из таблицы 1 получаем границы отклонений

$$\begin{aligned} -1 &\leq \delta_0 \leq 0, \\ 0 &\leq \delta_1 \leq \alpha_2 + 1, \\ -1 &\leq \delta_2 \leq 1 - \alpha_2. \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом, на основе перекладывающихся торических разверток авторам удалось получить семейство двумерных множеств ограниченного остатка и определить точные границы отклонений (3) для полученных множеств.

Описанный метод, построения множеств ограниченного остатка на основе перекладывающихся торических разверток с некоторыми модификациями [7] можно применить для двумерного моделирования периодических структур на основе трансляционных полимино.

Список использованной литературы

1. Szűsz, R. Über die Verteilung der Vielfachen einer komplexen Zahl nach dem Modul des Einheitsquadrats/ R. Szűs// Acta Math. Acad. Sci. Hungar. —1954. — №5. — P. 35-39.
2. Rauzy G. Nombres alge 0 briques et substitutions/ G. Rauzy // Bull. Soc. Math. France. — 1982. — №110. — P. 147-178.
3. Ferenczi, S. Bounded remainder sets/ S. Ferenczi// Acta Arithmetica. — 1992. — V. 61. — P. 319-326
4. Журавлев, В. Г. Разбиения Розы и множества ограниченного остатка/В. Г. Журавлев// Записки научных семинаров ПОМИ. — 2005. — Т. 322. — С. 83-106.
5. Журавлев В. Г. Перекладывающиеся торические развертки и множества ограниченного остатка. // Записки научных семинаров ПОМИ. —2011.—№ 392. —С. 95–145.
6. Абросимова А. А., Средние значения отклонений для распределения точек на торе// Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика. Физика. г. Белгород: НИУ БелГУ, 2012. №. 5(124).Вып. 26.С. 5–11.
7. Осипова А.А., Монатова А.А. Построение перекладывающихся полимино // Актуальные проблемы развития науки и современного образования: сборник материалов Международной научно-практической конференции (Белгород, 10 апреля 2017 г). – Белгород: ИД «Белгород» НИУ «БелГУ», 2017. С. 57-59.

nWC-ДОПОЛНЕННЫЕ WC-Co ТВЕРДЫЕ СПЛАВЫ И Al-/Zr-ОКСИДНЫЕ КОМПОЗИТЫ

А.А. Геворгян ¹

¹ *Vlkanova, Slovakia*

albert.gevorgyan94gpm@gmail.com

Аннотация. Являющийся самым твердым из бинарных карбидов, WC остается наиболее привлекательной основой в разработке материалов инструментальных применений, поскольку первым условием их эффективности является превосходство твердости обрабатываемого материала над обрабатываемым.

Ключевые слова. Монокарбид вольфрама (WC), Al-/Zr-оксидные композиты.

Весомыми аргументами WC в инструментальных альтернативах является также уникальное сочетание высоких термо- и износостойкости, сопротивляемости термоудару и устойчивости к окислению. Практическая востребованность и реализуемость WC [1] ограничивается дефицитом вольфрама, что в условиях национальных сырьевых возможностей особенно актуализирует его рациональное использование в изделиях отечественного производства, требует повышенного внимания к конкурентоспособному совершенствованию конструкторско-технологического уровня разработок инструментальных материалов, обеспечивающему их рыночную технико-экономическую состоятельность.

Дополнение стандартно-размерных порошковых комбинаций в технологиях WC-Co твердых сплавов замещающим до 30 мас. % стандартной исходной насыпки нанопорошком WC, с последующим применением горячего прессования с электронагревом прямым токоподводом, позволило получить материалы с повышенными термо-механическими характеристиками, в том числе с повышением твердости. Например, для соответствующей марке ВК8 химической композиции – до статистического ожидания 18–19 ГПа при исходном использовании 15 мас. % nWC, против традиционных 16–17 ГПа для ВК8 по стандартной технологии. Достигнутый эффект является следствием прежде всего повышения объемной равномерности и дисперсности содержания WC в

синтезируемом твердосплавном продукте, большего числа связующих мостиков кобальтовой сферы, при этом более тонких, что подтверждается электронно-микроскопическими исследованиями.

Включенное использование порошка nWC способствует лучшей укладке зерен в процессе прессования и активации спекания. В опытном производстве твердых сплавов в условиях ООО «Кермет-Украина» (г. Харьков) это позволило проводить его в рабочем цикле повышенной экономичности, с меньшим уровнем температурной и энергозатратной нагрузки, что окупает дополнительные затраты на импортируемый порошок nWC у производителя. Потребитель же получает продукт расширенных функциональных возможностей при тех же затратах на его единицу, что и при использовании конвенциональных рыночных предложений, и экономит в полном покрытии производственной потребности, благодаря повышенной ресурсной емкости единичного изделия.

Наша практика в условиях опытно-производственной базы ООО «Кермет-Украина» связана с использованием nWC порошка с размером зерна 40–70 нм плазмохимического производства фирмы Wolfram (Австрия). Смешивание порошков для производства дополненных nWC твердых сплавов осуществляли в специальном керамическом барабане, куда под давлением 15 МПа подавался воздух. Это позволило достаточно равномерно смешать частички с размерами 1–2 мкм смеси WC-Co с нанопорошком nWC. В качестве пластификатора при прессовании использовали петролатум. После прессования под давлением до 100 МПа образцы спекали в вакуумной печи с прямым пропусканием переменного электрического тока промышленной частоты 50 Гц при температуре до 1400°C и выдержке 1,5 ч.

Аналогичная технологическая схема ускоренного ступенчатого нагрева переменным током промышленной частоты, в сочетании с определенным ступенчатым же режимом прессования, использована для получения конкурентоспособных в инструментальных применениях высокоплотных тонкодисперсных Al_2O_3 -nWC композитов. Спекание проводили в графитовых формах при температуре до 1600°C и давлении до 45 МПа. Весь процесс нагрева занимает 8–10 мин. со средней скоростью подъема температуры 150–200 °C/мин. Твердость полученных образцов составила HRA 91...93, трещиностойкость $K_{Ic} = 8–12 \text{ МПа м}^{1/2}$. Как показали проведенные испытания режущих пластин из Al_2O_3 -nWC (50/50

мас.%), их применение, например, при точении закаленной стали ШХ15 обеспечивает 30% прироста эксплуатационного ресурса инструмента по сравнению с традиционной практикой использования стандартных горячепрессованных пластин индукционного спекания ВОК 71 производства Светловодского завода твердых сплавов.

В настоящее время проводятся опытные испытания и физико-техническая диагностика образцов новых композиционных материалов ZrO_2 -3мас.% Y_2O_3 -nWC с применением в исходной насыпке нанопорошка ZrO_2 -3мас.% Y_2O_3 , состоящего из частиц сферической формы со средней размерностью 21-28 нм, полученных гетерофазным осаждением гидроксидов циркония и иттрия из концентрированных водных растворов солей этих металлов в растворе аммиака. Предварительные исследования полученных композиционных поливариантов с содержанием в них до 30 мас. % частично стабилизированного присутствием 3 мас. % Y_2O_3 диоксида циркония указывают на улучшение трещиностойкости и прочности по сравнению с nWC альтернативой. Практическую значимость этой разработки определяет обладание Украиной разрабатываемыми и разведанными рудными месторождениями циркония, извлекаемого из магматического силиката $Zr(SiO_4)$, в объемах, сопоставимых с США и уступающих только Австралии и ЮАР. Циркониевый сырьевой приоритет Украины объективно стимулирует дальнейшее развитие разработок в этом направлении.

Список использованной литературы

1. Самсонов Г.В., Витрянюк В.К., Чаплыгин Ф.И. Карбиды вольфрама// Киев: Наукова думка, 1974. — 176 с.

ПЕРЕКЛАДЫВАЮЩИЕСЯ ПОЛИМИНО С СИММЕТРИЯМИ

А.А. Мокрова¹, В.Г. Журавлев²

^{1,2}*д.ф.-м.н., профессор, Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых*
albina.mokrova@yandex.ru

Аннотация. В работе описан алгоритм построения трансляционных полимино, заданной площади, а также рассмотрены примеры полимино,

обладающих различными видами симметрии, построенные с помощью описанного алгоритма.

Ключевые слова. Полимино, модели молекулярных кристаллов, симметрия.

Полимино широко применяются при моделировании дискретных структур, в частности, в кристаллографии на основе полимино строятся двумерные модели молекулярных кристаллов. Особый интерес представляют трансляционные полимино, обладающие симметрией.

Полимино (полиомино) – это фигура, составленная из квадратов, каждый из которых имеет, по крайней мере, одну сторону, общую с другим входящим в неё же квадратом. Этот термин впервые был введен в употребление С.В. Голомбом в работе [1].

Результаты, представленные авторами, базируются на применении метода «звезды», предложенного в 2000 г. В.Г. Журавлевым и позднее опубликованного в работе [2], и метода разбиения гексагональной развертки тора на перекладывающиеся области, рассмотренного в работах А.А. Мокровой (Абросимовой), впервые опубликованного в работе [3].

Назовем полимино P перекладывающимся, если задано его разбиение на более мелкие полимино P_1, P_1, \dots, P_k , такое, что их перекладывание вновь дает исходную фигуру.

Рассмотрим алгоритм построения перекладывающихся полимино (рисунок 1).

Пусть на плоскости имеется квадратная сетка S , базис которой $e_1 = (1,0)$, $e_2 = (0,1)$.

1. Построим на сетке S параллелограмм K , стороны которого задаются векторами $n_1 = (n_{11}e_1, n_{12}e_2)$, $n_2 = (n_{21}e_1, n_{22}e_2)$, тогда координаты вершин параллелограмма $K_1 = (x_0, y_0)$, $K_2 = (x_0 + n_{11}, y_0 + n_{12})$, $K_3 = (x_0 + n_{21}, y_0 + n_{22})$, $K_4 = (x_0 + n_{11} + n_{21}, y_0 + n_{12} + n_{22})$, $n_{11}, n_{12}, n_{21}, n_{22} \in \mathbb{N}, x_0, y_0 \in \mathbb{Z}$.

2. Проведем в параллелограмме K диагональ K_2K_3 . Внутри треугольника $K_1K_2K_3$ построим «звезду» C . Для этого выберем произвольную точку C_0 с целыми координатами и соединим ее с вершинами треугольника $K_1K_2K_3$ лучами r, b, g соответственно.

Договоримся, что любой луч на плоскости может проходить только по границе сетки S , начинаться и заканчиваться только в вершинах сетки S .

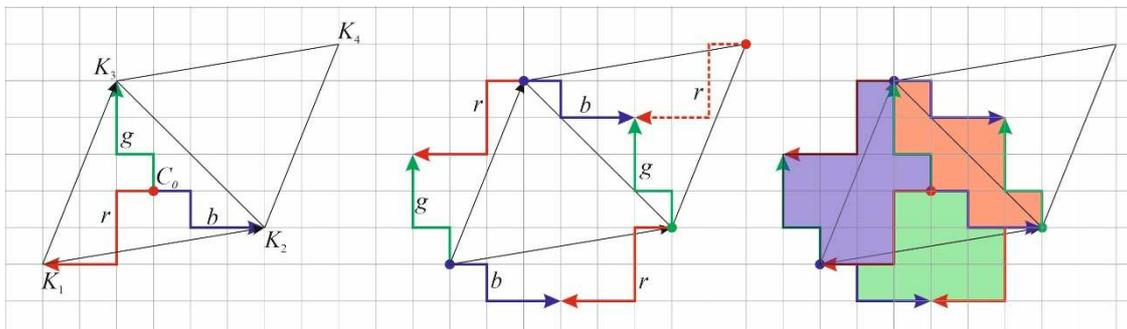


Рисунок 1.

3. Построим на основе «звезды» C полимино. От вершин K_2, K_3, K_4 параллелограмма K будем откладывать луч r , и соединять концы отложенных лучей и вершину квадрата K_1 лучами b и g . Получим полимино P , образованное шестью лучами трех типов r, b, g , разбитое «звездой» C на три более мелких полимино R, B, G . При этом, количество клеток сетки, образующих исходное полимино P будет равно значению определителя $\begin{vmatrix} n_{11} & n_{12} \\ n_{21} & n_{22} \end{vmatrix}$.

Для получения корректного результата с помощью данного алгоритма необходимо учесть следующее:

- 1) лучи r, b, g «звезды» C и их части не должны накладываться и пересекаться, а также не должно совпадать их направление;
- 2) часть луча «звезды» C может совпадать с частью луча полимино, но пересечения также не допустимы.

В [4] описано доказательство следующей теоремы.

Теорема. Описанный алгоритм порождает трансляционные перекладывающееся полимино P с векторами трансляции параллелограмма K . Малые полимино R, B, G также являются трансляционными, со своими векторами трансляции.

Рассмотренный метод позволяет не только строить трансляционные полимино P с заданным числом клеток и их разбиения плоскости, но и трансляционные разбиения плоскости на три полимино R, B, G , и трансляционные разбиения плоскости на порожденные полимино R, B, G в отдельности, а также трансляционные разбиения состоящие из пар полимино RB, RG, BG . Примеры построения приведены в работе [4].

С помощью переключивающихся полимино могут быть описаны молекулы кристаллов не только одинакового состава, но различной структуры (молекулы-изомеры).

Рассмотренный алгоритм так же позволяет строить полимино с заданной симметрией.

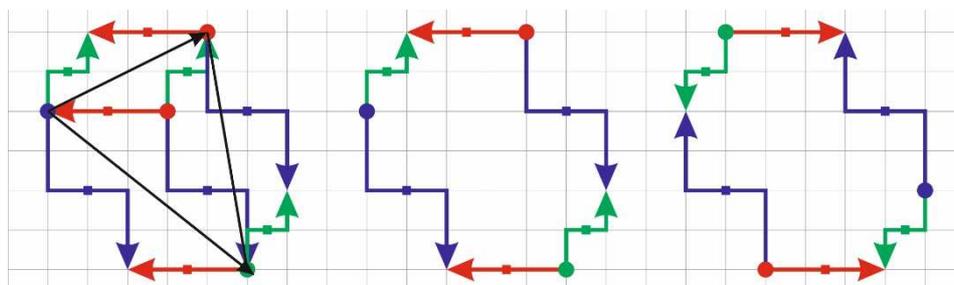


Рисунок 2.

Могут быть построены центрально-симметричные полимино. Для этого каждый из лучей звезды должен обладать центральной симметрией (рисунок 2). На рисунке центры симметрии лучей отмечены квадратами. Получить центрально-симметричные полимино оказалось наиболее простым.

На данный момент с помощью рассмотренного алгоритма могут быть построены полимино с поворотно симметрией четвертого порядка (рисунок 3).

В этом случае параллелограмм должен иметь углы в 90° и равные стороны, т.е. являться квадратом. Центр «звезды» S выбирается в одной из вершин квадрата, при этом один из лучей вырождается в точку. Два невырожденных луча могут быть получены один из другого с помощью поворота на 90° и являются центрально симметричными, при этом центры симметрии лежат на сторонах квадрата.

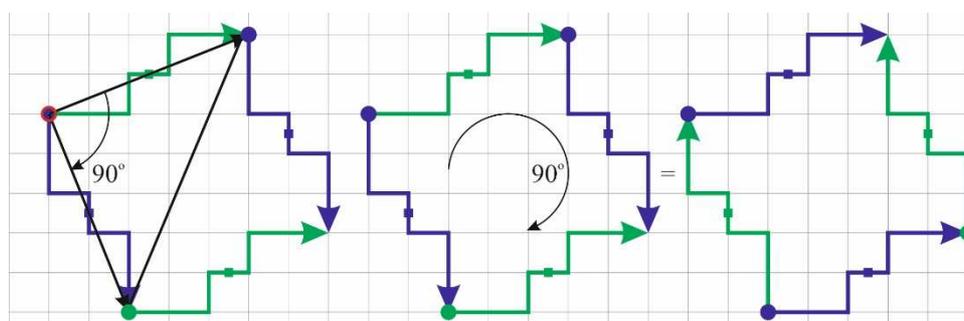


Рисунок 3.

Также с помощью данного метода могут быть получены полимино с зеркальной симметрией (рисунок 4).

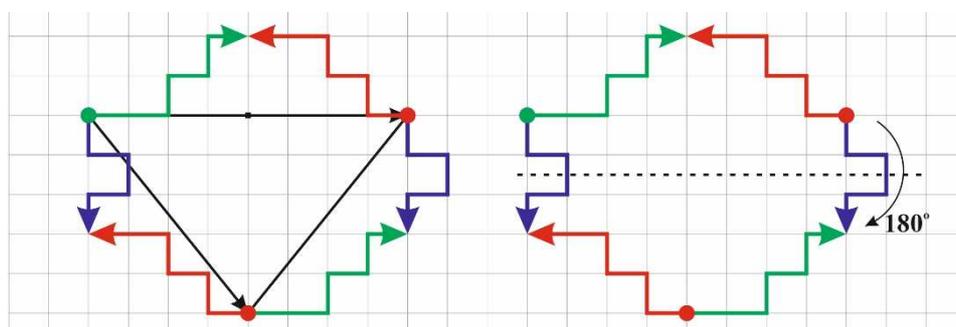


Рисунок 4.

Симметрия является важным атрибутом в описании кристаллических структур. Полученные авторами результаты расширяют возможности применения полимино для двумерного моделирования молекулярных кристаллов.

Список использованной литературы

1. Голомб, С. В. Полимино. – М.: Мир, 1975. – 207 с.
2. Журавлев, В.Г. Полимино с симметриями: учебное пособие для самостоятельной работы по математике // В.Г. Журавлев, А.А. Осипова; Автоном. некоммерч. образоват. орг. высш. образования Центросоюза Рос. Федерации «Рос. ун-т кооперации», Владим. фил. – Владимир: ООО «Аркаим», 2016. – 48 с.
3. Абросимова А.А., Журавлев В.Г. Двумерное обобщение теоремы Гекке и сбалансированные слова // Алгебра и теория чисел: современные проблемы и приложения: тез. докл. VIII Международной конференции, посвященной 190-летию П.Л. Чебышева и 120-летию И.М. Виноградова. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та. – 2011. – С. 3-4.
4. Осипова А.А., Монатова А.А. Построение перекладывающихся полимино // Актуальные проблемы развития науки и современного образования: сборник материалов Международной научно-практической конференции (Белгород, 10 апреля 2017 г). – Белгород: ИД «Белгород» НИУ «БелГУ», 2017. С. 57-59.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ АНИЗОТРОПИЯ РАБОТЫ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА МЕТАЛЛОВ

В.С. Олешко¹

¹*Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)
e-mail oleshkovs@mai.ru*

Аннотация. Рассмотрена анизотропия работы выхода металлов. Представлены формулы, описывающие зависимость работы выхода от ретикулярной плотности граней кристаллов. Показана необходимость учёта кристаллографической анизотропии работы выхода.

Ключевые слова. Металл, кристалл, анизотропия, работа выхода электрона.

Фундаментальной характеристикой твёрдого тела, в том числе металлов и металлических сплавов деталей машин, является работа выхода электрона (РВЭ). Определение величины работы выхода металлических деталей машин позволяет оценивать многие их свойства. Определить величину РВЭ позволяет метод контактной разности потенциалов [1].

Работа выхода чувствительна к состоянию поверхности металлов, которую покидают электроны. На величину РВЭ оказывают влияние плотность упаковки атомов, адсорбция инородных атомов. Однако основным фактором, определяющим величину РВЭ, является электронная структура поверхности и приповерхностных слоёв металла.

Работа выхода с разных граней монокристаллических металлов с чистой поверхностью отличаются друг от друга.

В работе [1] показано, что анизотропия РВЭ, связанная с зависимостью от кристаллографических индексов Миллера hkl может достигать 1 эВ.

Значительное влияние на РВЭ оказывают дефекты кристаллической решётки. Например, такие субмикроскопические дефекты, как краевые или винтовые дислокации, уменьшают РВЭ. С точки зрения кристаллографии поверхность кристалла является неустранимым дефектом [2].

Поэтому для более точного определения величины работы выхода необходимо учитывать её кристаллографическую анизотропию.

Нами проведена оценка кристаллографической анизотропии работы выхода чистых металлов, широко применяемых в машиностроении, электротехнике и электронике. Точнее была определена зависимость РВЭ металлов от ретикулярной плотности граней их кристаллов. Исходные данные взяты из источника [3].

Ретикулярная плотность d граней кристаллов, имеющих ГЦК решётку, определялась по формулам:

$$d_{(100)} = \frac{2}{a^2}; d_{(110)} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}}; d_{(111)} = \frac{4}{a^2\sqrt{3}},$$

где a – параметр решётки.

На рисунке 1 представлены построенные методом наименьших квадратов графики функций зависимости работы выхода W от ретикулярной плотности d граней кристаллов металлов с ГЦК решёткой.

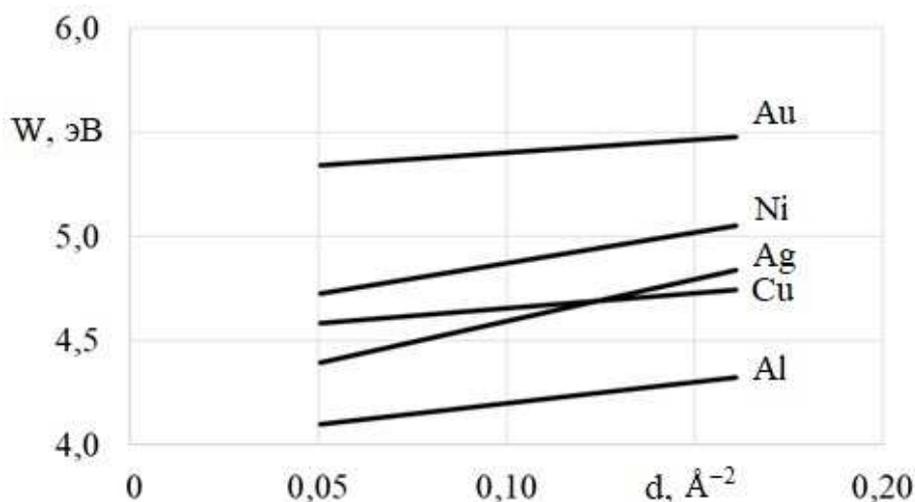


Рисунок 1.

В таблице 1 представлены определённые методом наименьших квадратов линейные уравнения, описывающие зависимости РВЭ W от ретикулярной плотности граней кристаллов d .

Металл	Уравнение
Al	$W=2,0584d+3,9938$
Ni	$W=2,9168d+4,5806$
Cu	$W=1,4801d+4,508$
Au	$W=1,2549d+5,278$
Ag	$W=3,9836d+4,1948$

Таблица 1.

Как видно из рисунка 1 и таблицы 1 с увеличением ретикулярной плотности граней d работа выхода W так же увеличивается. Это объясняется тем, что более плотным кристаллографических плоскостям присущи более сильные электронные связи.

Реальные поликристаллические металлы и сплавы деталей машин имеют поверхность, состоящую из произвольно ориентированных монокристаллитов. Поэтому для таких поверхностей величину РВЭ следует рассматривать как интегральную величину, включающую различные кристаллографические плоскости.

Кристаллографическую анизотропию РВЭ необходимо учитывать при контроле чистых металлов, тонких плёнок, наноматериалов, в микроэлектронике при расчёте параметров их поверхности и физико-химических процессов, происходящих на ней.

Вывод. Ретикулярную анизотропию работы выхода электрона металлов необходимо учитывать в науке и технике.

Список использованной литературы

1. Гончаренко В.И., Олешко В.С. Метод контактной разности потенциалов в оценке энергетического состояния поверхности металлических деталей авиационной техники: монография. — М.: Изд-во МАИ, 2019. 160 с.
2. Владимиров А.Ф. Термодинамический, кристаллографический и дефектно-деформационный аспекты изменения работы выхода электрона. Дисс. ... к.ф.-м.н. — Рязань: РГСА, 2001. 211 с.
3. Бокарев В.П. Развитие физико-химических принципов оценки влияния поверхностной энергии на свойства материалов и процессы для технологии микроэлектроники. Дисс. ... д.т.н. — М.: Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», 2020. 299 с.
4. Владимиров Г.Г. Физическая электроника. Эмиссия и взаимодействие частиц с твердым телом: Учеб. пособие. — СПб.: Изд-во «Лань», 2013. 368 с.

РЕШЕТЧАТЫЕ И ИЗОЭДРАЛЬНЫЕ РАЗБИЕНИЯ ПЛОСКОСТИ НА ДВА ОДИНАКОВОЙ ФОРМЫ ГЕПТАМИНО

К.А. Потехин¹, К.Г. Серавкин²

¹доктор физико-математических наук, профессор кафедры ФМОиИТ

²аспирант кафедры ФМОиИТ

Владимирский государственный университет, Владимир, Россия

konstantin-potekhin@yandex.ru

Аннотация. Построены решетчатые и изоэдральные разбиения плоскости на два гептамино одинаковой формы. Исследованы структурные классы полученных разбиений плоскости. В разбиениях плоскости, которые относятся к структурному классу $p1; Z = 2(1,1)$ обнаружены локальные плоскости скользящего отражения.

Ключевые слова. Разбиения плоскости на полимино, структурные классы, локальные элементы симметрии.

Для построения решетчатых и изоэдральных разбиений плоскости на два гептамино использован алгоритм, предложенный А.В. Малеевым [1]. Особенностью этого алгоритма является то, что при построении разбиений плоскости на полимино нет необходимости знать форму самого полимино. Выбор подрешетки квадратной решетки трансляций (первый этап алгоритма) задает элементарную ячейку (не обязательно приведенную) решетки трансляций будущего разбиения плоскости на полимино. Анализ n -значного числа в четверичной системе исчисления с учетом выбранной подрешетки квадратной решетки трансляций (второй этап алгоритма), формирует границы между полимино. Следовательно, форма полимино получается как результат использования алгоритма.

Построено 464 симметрически независимых варианта разбиений плоскости на два гептамино одинаковой формы, из которых 18 вариантов относятся к решетчатым разбиениям плоскости, а остальные 446 вариантов являются изоэдральными разбиениями плоскости на полимино.

В алгоритме [1] используются подрешетки квадратной решетки трансляций (квадратной сетки). Любая подрешетка решетки трансляций сама является решеткой трансляций. В таблице 1 указаны коды подрешеток (в соответствии с [1]), типы их решеток трансляций и

параметры приведенных элементарных ячеек этих решеток, которые выражены в долях периода повторяемости квадратной решетки.

Код подрешетки	Тип решетки трансляций	Параметры элементарной ячейки		
		a	b	γ , град.
14 1 ₁	Прямоугольная примитивная	$\sqrt{2}$	$7\sqrt{2}$	90
14 1 ₂	Косоугольная	$\sqrt{5}$	$2\sqrt{10}$	99
14 1 ₃	Косоугольная	$\sqrt{10}$	$2\sqrt{5}$	98
14 1 ₄	Косоугольная	$\sqrt{13}$	$\sqrt{17}$	110
14 1 ₆	Косоугольная	$2\sqrt{2}$	5	98
14 1 ₇	Прямоугольная центрированная	2	14	90
7 2 ₀	Прямоугольная примитивная	2	7	90

Таблица 1. Параметры приведенных элементарных ячеек решеток трансляций для подрешеток квадратной решетки.

Косоугольная приведенная элементарная ячейка решетки трансляций используемой подрешетки, является существенным лимитирующим фактором для реализации разбиений плоскости, у которых плоская группа симметрии содержала бы кристаллографическую плоскость зеркального и/или скользящего отражения. Следовательно, в подрешетках 14 1₂, 14 1₃, 14 1₄ и 14 1₆ могут реализоваться только такие разбиения плоскости, которые имеют плоскую группу симметрии p1 или p2.

Количество изоэдральных разбиений плоскости, которые относятся к структурным классам $rgg_2; Z=2(2)$ и $rmg_2; Z=2(m)$ очень мало. Дело в том, что существенным лимитирующим фактором в данном случае является не только тип решетки трансляций, но и точечная группа симметрии самого гептамино. Так для реализации разбиений плоскости, которые относятся к структурному классу $rgg_2; Z=2(2)$, гептамино должно занимать частную позицию на оси симметрии 2, следовательно, иметь собственную ось 2. В разбиениях плоскости, которые относятся к структурному классу $rmg_2; Z=2(m)$, гептамино должно занимать частную позицию на плоскости зеркального отражения, следовательно, оно само должно быть зеркально симметричным.

Номер разбиения	Код подрешетки	Цифровой код разбиения
1	14 1 ₁	33222222111111
14	14 1 ₁	33201322113201
19	14 1 ₁	33032032130130
22	14 1 ₁	33011132132220

Таблица 2. Номера и цифровые коды разбиений плоскости, которые относятся к структурному классу $pgg2; Z=2(2)$.

Номер разбиения	Код подрешетки	Цифровой код разбиения
32	14 1 ₁	32303030313030
36	14 1 ₁	32301320313201
42	14 1 ₁	32232030131130
44	14 1 ₁	3223220113111
456	7 2 ₀	32222222322222
457	7 2 ₀	3222222232222
458	7 2 ₀	3222222223222

Таблица 3. Номера и цифровые коды разбиений плоскости, которые относятся к структурному классу $pmg2; Z=2(m)$.

Зеркально симметричные гептамино мы обнаружили в 42-х вариантах разбиений плоскости, но только в семи вариантах собственная плоскость зеркального отражения гептамино реализовалась как кристаллографическая. Следовательно, наличие собственной плоскости зеркального отражения у полимино, являясь необходимым, не является достаточным условием для реализации разбиения плоскости, которое относилось бы к структурному классу $pmg2; Z=2(m)$.

Разбиения плоскости, которые относятся к структурному классу $cm; Z=4(1)$, реализовались только в подрешетке 14 1₇ потому, что только у этой подрешетки решетка трансляций является прямоугольной центрированной.

Разбиения плоскости, которые относятся к структурному классу $p1; Z=2(1,1)$, являются решетчатые разбиениями плоскости на полимино, потому, что никаких кристаллографических симметрических преобразований кроме решетки трансляций, в этих разбиениях нет. Более того, они являются двухорбитными разбиениями плоскости на полимино, потому, что в элементарной ячейке решетки трансляций этих разбиений присутствуют два симметрически независимых гептамино, которым

соответствуют две правильные системы точек. В подрешетке $14 \ 1_6$ реализовалось 17 вариантов таких двухорбитных решетчатых разбиений плоскости, номера и цифровые коды которых представлены в таблице 4, и один вариант реализовался в подрешетке $14 \ 1_3$ (№148, цифровой код – 32210210132100).

Номер разбиения	Цифровой код разбиения	Номер разбиения	Цифровой код разбиения
281	33221123022111	320	32312103001221
286	32212302013031	321	32311232001300
288	33212123021211	327	32301212031321
289	33211322013030	328	32301122031312
303	33023022113010	332	32232103000101
307	33013222110300	348	32213210100300
312	33003102122301	354	32131321212030
314	33003002121321	366	32112302213031
319	32321103002121		

Таблица 4. Номера и цифровые коды решетчатых разбиений плоскости в подрешетке $14 \ 1_6$, которые относятся к структурному классу p_1 ; $Z=2(1,1)$.

В 16 вариантах таких разбиений плоскости на два гептамино, мы обнаружили локальные плоскости скользящего отражения. Каждая из этих локальных плоскостей скользящего отражения «работает» только в пределах «своей» области разбиения. Эти области являются конечными в одном и бесконечными периодическими в другом направлении фрагментами разбиения плоскости.

Выводы

1. Для каждого из 464 вариантов разбиений плоскости на два гептамино одинаковой формы можно указать структурный класс.
2. В исследованных разбиениях обнаружены локальные плоскости скользящего отражения.

Список использованной литературы

1. Малеев А. В. Алгоритм и программа перебора разбиений плоскости на полимино // Кристаллография. 2001. Том 46, № 1. С. 165-167.

ДВОЙНОЙ ДВУХСТОРОННИЙ ЗАХВАТ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ И В РАЗБИЕНИЯХ ПЛОСКОСТИ НА ПОЛИМИНО

К.А. Потехин¹

¹д. ф.-м.н., профессор кафедры ФМОиИТ, Владимирский государственный университет имени А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир
konstantin-potekhin@yandex.ru

Аннотация. Предложено использовать дважды периодические разбиения плоскости на полимино для анализа взаимного расположения молекул в молекулярных слоях кристаллических структур. Обсуждаются двойные двухсторонние захваты в кристаллических структурах и в разбиениях плоскости на полимино.

Ключевые слова. Молекулярные агломераты в кристаллах, разбиения плоскости на полимино, «разбиения близнецы».

В работе [1] показано, что даже при отсутствии специфических межмолекулярных взаимодействий в кристаллических структурах могут существовать энергетические ловушки, энергия которых сопоставима с энергией водородной связи. К таким энергетическим ловушкам относится и двойной двухсторонний захват.

Двойной двухсторонний захват состоит из двух двухсторонних захватов. Двухсторонний захват («хелат», «клешня») возникает, если базисная молекула с двух сторон захватывает какой-либо фрагмент молекулы первой координационной сферы. Если же в свою очередь, упомянутая выше, молекула первой координационной сферы так же с двух сторон захватывает фрагмент базисной молекулы, то такая энергетическая ловушка называется двойной двухсторонний захват [1].

В кристаллической структуре этил-2-дицианометилен-4-метил-6-фенил-3-циклогексен-1-карбоксилат (1) обнаружены два двойных двухсторонних захвата, энергия которых составила -17 кДж/моль и -18 кДж/моль [1]. Эти два межмолекулярных контакта являются структурообразующими, за счет них в кристаллической структуре (1) сформировались молекулярные агломераты в виде молекулярных слоев. Энергия взаимодействия между молекулами в слое существенно превышает энергию взаимодействия между молекулами из соседних слоев.

Для исследования особенностей взаимного расположения молекул в молекулярных слоях кристаллических структур можно использовать такую математическую модель, как дважды периодические разбиения плоскости на полимино. Полимино моделирует форму молекулы, а взаимное расположение полимино в разбиении плоскости моделирует взаимное расположение молекул в молекулярном слое. Протяженность границы между полимино соответствует энергии взаимодействия между соседними молекулами.

В элементарной ячейке молекулярного слоя кристаллической структуры (1) содержится две молекулы, связанные центром инверсии. Следовательно, такой молекулярный слой можно моделировать с помощью разбиения плоскости на два полимино одинаковой формы.

В разбиениях плоскости на два гептамино одинаковой формы обнаружены два разбиения, в которых имеются двойные двухсторонние захваты. На рис. 1 представлены фрагменты этих разбиений: № 183 и № 221.

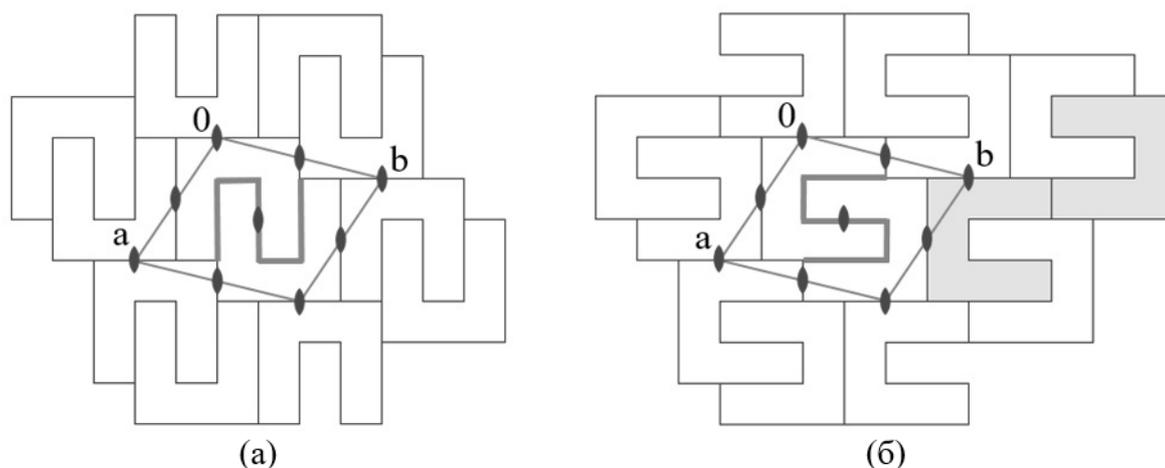


Рисунок 1. Фрагменты разбиений плоскости № 183 (а) и № 221 (б)

В обоих разбиениях базисное полимино обхватывает с двух сторон фрагмент полимино своей первой координационной сферы (первый двухсторонний захват). В свою очередь, полимино первой координационной сферы обхватывает с двух сторон фрагмент базисного полимино (второй двухсторонний захват). В результате получается двойной двухсторонний захват.

Полимино, обнаруженные в этих разбиениях плоскости совпадают по форме. Следовательно, они имеют одинаковую длину периметра, которая равна 16. Длина самой протяженной линии соприкосновения двух полимино, одна из которых изображена на рисунке толстой линией, тоже совпадает и равна 8. Получается, что на этот контакт между полимино приходится 50 % периметра каждого из них.

Оба разбиения плоскости получены в подрешетке 14×14 . Следовательно, они имеют одинаковые решетки трансляций. Элементарные ячейки решеток трансляций этих разбиений показаны на рис. 1 (а) и рис. 1 (б), соответственно. То и другое разбиения относятся к структурному классу $p2, Z = 2$ (1). Более того, даже последовательности длин линий соприкосновения базисного полимино с полимино его первой координационной сферы, тоже совпадают: 8, 1, 3, 2, 1, 1. Следовательно, разбиения № 183 и № 221 – это «разбиения близнецы».

Тем не менее, несмотря на то, что такие геометрические параметры, как форма полимино, решетка трансляций разбиения плоскости, структурный класс, последовательность длин линий соприкосновения базисного полимино с полимино его первой координационной сферы, полностью совпадают, эти два разбиения плоскости на полимино все же разные. Например, в разбиении № 221 имеется фрагмент из двух полимино (на рис. 1 (б) показан заливкой), которого нет в разбиении № 183.

Выводы исследования

1) Дважды периодические разбиения плоскости на полимино можно использовать в качестве математической модели при исследовании и описании взаимного расположения молекул в молекулярных слоях кристаллических структур.

2) Двойной двухсторонний захват наблюдается не только в молекулярных кристаллах, но и разбиениях плоскости на полимино.

Список использованной литературы

1. А. И. Исмиев, К. А. Потехин, А. В. Малеев, А. М. Магеррамов Синтез этил-2-дицианметилен-4-метил-6-фенил-3-циклогексен-1-карбоксилата и молекулярные агломераты в его кристаллической структуре // Журнал структурной химии. 2019. Т. 60, № 12. С. 1980 – 1990.

КООРДИНАЦИОННЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ И ПРЕДЕЛЬНЫЕ МНОГОУГОЛЬНИКИ РОСТА ТРАНСЛЯЦИОННЫХ КВАДРАТНЫХ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ НА ДВА КОНГРУЭНТНЫХ ГЕПТАМИНО

К.Г. Серавкин¹, К.А. Потехин²

¹аспирант кафедры ФМОиИТ

²доктор физико-математических наук, профессор кафедры ФМОиИТ

^{1,2}Владимирский государственный университет, Владимир

¹seravkin@rambler.ru, ²konstantin-potekhin@yandex.ru

Аннотация. Пределные многоугольники роста можно использовать как дополнительную информацию для классификаций разбиений плоскости на полимино. Для полученных с помощью алгоритма Малеева трансляционных квадратных разбиений плоскости на гептамино с двумя конгруэнтными гептамино в области трансляции выполнен анализ плоских групп, структурных классов, формы полимино, координационных последовательностей, выполнена классификация разбиений по форме предельного многоугольника роста.

Ключевые слова. Квадратные разбиения плоскости на полимино, координационные последовательности, предельные многоугольники роста

Малеев предложил алгоритм перебора трансляционных разбиений плоскости на полимино, центры ячеек которых можно расположить на квадратной решетке $\mathbb{Z}^2[1]$. Разбиение плоскости называется трансляционным, если в разбиении можно выделить область трансляции, которой можно заполнить всю плоскость без пропуска двумя неколлинеарными параллельными переносами. Назовём разбиения плоскости на полимино, у которых центры ячеек полимино лежат на квадратной решетке \mathbb{Z}^2 как *квадратные разбиения*.

Всего существует 464 трансляционных квадратных разбиений плоскости на гептамино с двумя конгруэнтными гептамино в области трансляции (далее просто разбиения). В таблице 1 приведено распределение полученных нами разбиений по первому координационному числу КЧ(1). Все полученные разбиения характеризуются КЧ(1) из множества {4, 5, 6}. На рисунке 1 представлены

примеры наиболее распространенных многоугольников роста для разных КЧ(1) с их подрешетками и пространственными группами разбиения. Рядом с многоугольником роста представлено суммарное действие на многоугольник роста точечной группы $4mm$.

Первое координационное число	4	5	6	Итого
Количество разбиений	32	110	322	464
Количество различных форм многоугольника роста	12	30	43	85

Таблица 1. Распределение разбиений по первому координационному числу

Кроме первой координационной сферы целесообразно рассматривать вторую, третью и т.д. координационные сферы. Координационные числа последовательных координационных сфер образуют координационную последовательность, где k -й член совпадает с числом полимино в k -й координационной сфере[2]. Для всех полученных разбиений координационные последовательности представляют собой линейно возрастающую последовательность $KЧ(n) = n KЧ(1)$.

При увеличении номера координационной сферы форма самой координационной сферы стремится к некому предельному феноменологическому многоугольнику роста[2]. При чем, во всех рассмотренных случаях (и для решетчатых, и для изоэдральных разбиений) и форма, и ориентация многоугольника роста на плоскости не зависит от того, какое из двух полимино области трансляции выбрать в качестве базисного. Поэтому для полученных разбиений достаточно построить предельный многоугольник роста только для одного из двух полимино.

Форма предельного многоугольника роста слабо зависит от формы полимино в разбиении плоскости. Существуют разбиения плоскости на гептамино с разными формами полимино, у которых образуются одинаковые по форме многоугольники роста. Существуют разбиения плоскости на гептамино, у которых многоугольники роста одинаковы по форме и отличаются лишь ориентацией на плоскости относительно преобразований точечной группы $4mm$.

В подрешетках $[14\ 3|1]$ и $[14\ 6|1]$ существуют разбиения плоскости на гептамино с разными пространственными группами $p1$ и $p2$, дающими одинаковый по форме многоугольник роста с точечной симметрией 2 (рис. 1а). В подрешетке $[14\ 1|1]$ существуют разбиения плоскости с разными пространственными группами $p2$, $pgg2$, $pmg2$, дающими

одинаковый по форме многоугольник роста с точечной симметрией $2mm$ (рис. 1в).

Отсутствуют трансляционные квадратные разбиения плоскости на два конгруэнтных гептамино с разными первыми координационными числами и совпадающими по форме предельными многоугольниками роста. Другими словами, множества форм предельных многоугольников роста для разбиений с разными первыми координационными числами не пересекаются.

Любая сторона предельного многоугольника роста параллельна одному из узловых рядов двумерной решетки трансляций исследуемого разбиения плоскости на два конгруэнтных гептамино. Существуют разбиения в подрешетках $[14\ 2|1]$, $[14\ 4|1]$ и $[14\ 2|1]$, $[14\ 3|1]$, $[14\ 4|1]$, у которых совпадает форма предельных многоугольников роста. Это означает, что в этих подрешетках имеются совпадающие узловые ряды (рис. 1г).

Рассмотрим подробнее разбиения с $KЧ(1) = 4$. Тогда можно утверждать следующее:

1. Предельные многоугольники для всех 32-х вариантов разбиения плоскости имеют форму четырехугольника, с точечной группой симметрии 2.

2. Все 32 варианта разбиения плоскости имеют косоугольную решетку трансляций.

3. Четыре гептамино первой координационной сферы могут быть трансляционно идентичными. В этом случае, форма предельного многоугольника совпадает с формой одной из примитивных элементарных ячеек (не обязательно приведенной) решетки трансляций разбиения плоскости.

4. Четыре гептамино первой координационной сферы могут делиться на две пары. Каждая пара состоит из двух трансляционно идентичных гептамино. Одна пара гептамино преобразуется в другую пару поворотом на 180° вокруг оси, перпендикулярной плоскости разбиения. В этом случае, форма предельного многоугольника совпадает с формой одной из центрированных элементарных ячеек решетки трансляций разбиения плоскости.

На рисунке 1а приведен пример многоугольника роста с $KЧ(1) = 4$.

Рассмотрим подробнее разбиения с $KЧ(1) = \{5, 6\}$. Тогда можно сказать следующее:

1. Предельные многоугольники для всех вариантов разбиений имеют форму шестиугольника, через геометрический центр которого проходит поворотная ось второго порядка, перпендикулярно плоскости разбиения.

2. Разбиения могут иметь как косоугольную, так и прямоугольную решетку трансляций. В результате, предельный многоугольник может иметь точечную группу симметрии не только 2 , но и $mm2$.

На рисунке 1б, 1в приведён пример многоугольника роста с $KЧ(1) = 5$ и $KЧ(1) = 6$ соответственно и точечной группой $mm2$. На рисунке 1г приведен пример многоугольника роста с $KЧ(1) = 6$ и точечной группой 2 .

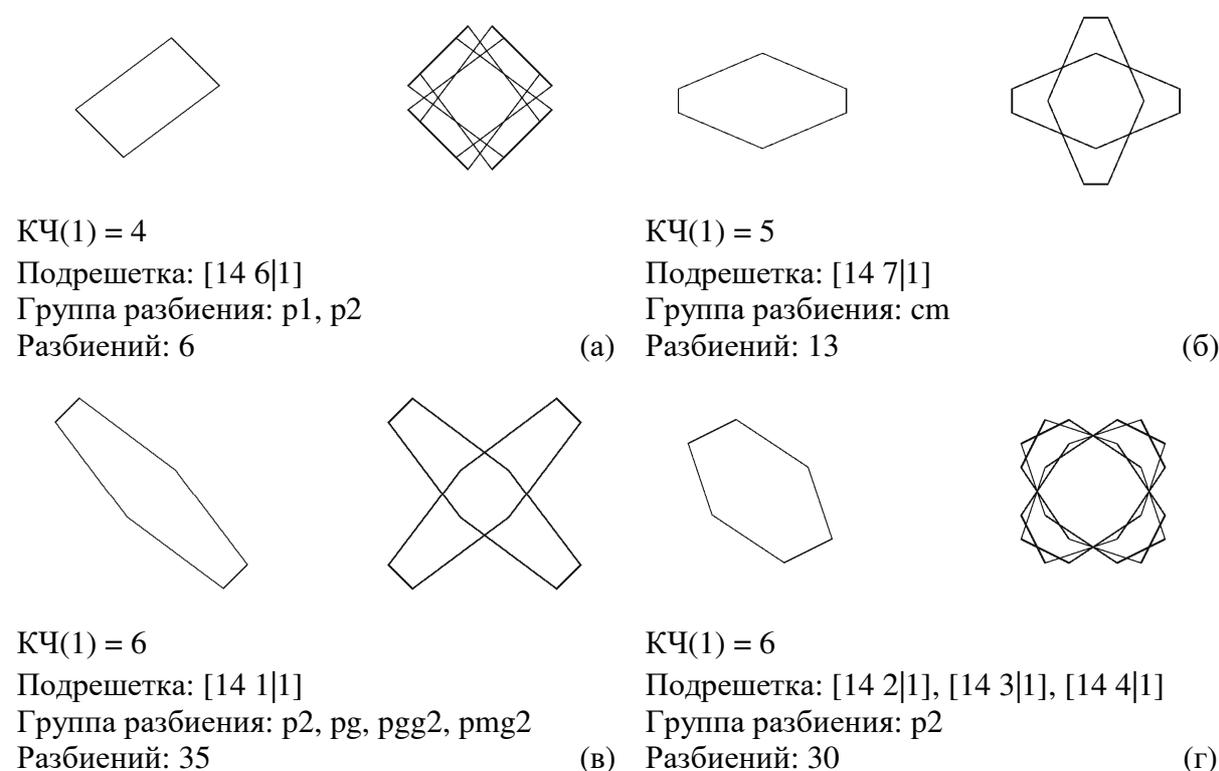


Рисунок 1. Наиболее распространённые многоугольники роста для разных $KЧ(1)$

Список использованной литературы

1. Малеев А.В. Алгоритм и программа перебора разбиений плоскости на полимино // Кристаллография. 2001. Том 46, № 1. С. 165-167.
2. Малеев А.В., Шутов А.В. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов: монография. – Владимир: ВГГУ, 2011. – 107 с.

МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР

К.В. Скворцов¹

¹*Владимирский юридический институт ФСИН России, Владимир*

k-skv@yandex.ru

Аннотация. В работе предлагается использование банков атомно-молекулярных структур для анализа строения квантовых точек, применяемых в различных нанотехнологиях и используемых, в частности, в качестве элементов радиосистем на микро- и наноуровне. Также предложены алгоритмы «компьютерного наноскопа», позволяющего моделировать процесс роста структур кристаллических нанозародышей.

Ключевые слова. Нанотехнологии, квантовые точки, «компьютерный наноскоп», элементы радиосистем.

Классическое представление о нанотехнологиях, как это отмечается в открытой печати, в первую очередь, ассоциируется с такими областями, как полупроводниковая электроника (нанoeлектроника), с разработкой композитных материалов, с медицинским скринингом, а также с применением разнообразных наноструктур (нанокластеров, нанокристаллов, нанотрубок). Среди отмеченных выше областей использования структурной информации о нанобъектах различной природы важной задачей компьютерного моделирования является поиск структурных особенностей этих объектов. Это необходимо для создания наноэлементов радиосистем, микросхем (теперь уже наносхем), источников тока и т.п.

С наноструктурами в настоящее время сложилась такая же ситуация, как с кристаллами после открытия Лауэ возможности получения информации об атомарно-молекулярной структуре твердых тел дифракционными методами. Это был этап количественного накопления самих структур с последующим созданием банков структурных данных. Достаточно назвать Кембриджский банк структурных данных [1], содержащий на сегодняшний день описание более полумиллиона структур.

Создание «компьютерного наноскопа», предложенного и алгоритмически разработанного А.В.Малеевым на основе понятия модели генерации и послойного роста структур [2], и позволило получать в

компьютерном эксперименте формы квантовых точек, как результат роста упаковочных полиэдров кристаллических зародышей, и выявлять числовые закономерности последовательного образования устойчивых наноструктур с увеличивающимся количеством структурообразующих атомно-молекулярных фрагментов.

Отметим, что проблемы разработки современных базовых технологий производства систем нанoeлектроники и новых материалов, в основном упираются в решение задачи миниатюризации, как отдельных модулей, так и систем в целом. При этом переход на наноуровень возможен только при решении, в свою очередь, теоретических задач прогнозирования и практических задач прямого экспериментального исследования различных наноструктур. Теоретические исследования и изучение свойств наноструктур приведут к более широкому развитию технологии. Это, впоследствии, облегчит решение одной из задач современной нанотехнологии: формирование разнотипных гетероструктур, необходимых для развития технологий создания нанoeлементов радиосистем.

Таким образом, на основе анализа строения конкретных реальных молекулярных структур и на основе использования алгоритмов послойно-секториального роста зародышей кристаллов рассмотрена возможность априорного исследования соответствующих нанокластеров. С этой целью создан комплекс компьютерных программ, названный «компьютерный наноскоп», который позволяет выполнить не только количественное описание координационных сфер, но и их детальный анализ [3-4]. Предложенная методика получения в компьютерном эксперименте виртуальных наноструктур может быть положена в основу прогнозирования результатов реальных нанотехнологических процессов. Можно прогнозировать результаты взаимодействия различных молекул с поверхностью наноструктуры и наноструктуры с наноструктурой из другого вещества, контролировать эпитаксиальный рост, составляющий технологическую основу современной нанoeлектроники [5].

Список использованной литературы

1. Cambridge Structural Database (CSD) System, release. 2020.
2. Рау В.Г., Рау Т.Ф., Журавлев В.Г., Малеев А.В. Морфогенез кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок.– М.: Кристаллография, 2002, т. 47, N 5, с. 793-796.

3. Никитин О.Р., Ломтев Л.А., Скворцов К.В., Рау В.Г. Структуры квантовых точек в компьютерном наноскопе // Известия института инженерной физики. - 2009. - Т. 3. - № 13. - С. 25-29.
4. Никитин О.Р., Рау В.Г., Скворцов К.В., Ломтев Л.А. Органические полупроводники. Антрацен в компьютерном наноскопе // Известия института инженерной физики. – 2009. – Т. 4. – № 14. – С. 15-20.
5. Никитин О.Р., Рау В.Г., Скворцов К.В., Рау Т.Ф. Моделирование сборки фрактальных наноструктур для управляемых приемно-передающих устройств // Известия института инженерной физики. - 2010. - Т. 3. - № 17. - С. 39-42.

СТРУКТУРНЫЕ ДЕСКРИПТОРЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Н.В. Сомов¹, Е.В. Чупрунов²

^{1,2}*ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Физический факультет*
somov@phys.unn.ru

Аннотация. Структурный дескриптор – это интегральная количественная характеристика атомной структуры или её части. Применение различных структурных дескрипторов позволяет расширить возможности стандартного кристаллохимического анализа атомных структур кристаллов. В данной работе представлен ряд структурных дескрипторов, которые позволяют ввести количественные характеристики для кристаллического пространства с определенной симметрией. Показано, что при помощи таких структурных дескрипторов можно частично ответить на фундаментальный вопрос о «редких» группах симметрии. Предложены структурные дескрипторы, позволяющие количественно сравнивать реальные координационные полиэдры в атомных структурах кристаллов.

Ключевые слова. Структурный дескриптор, кристаллическое пространство, симметрия.

В настоящее время в мире накоплен огромный массив структурных данных. Однако лишь сравнительно небольшая часть этой гигантской информации систематически используется для решения актуальных вопросов физики конденсированного состояния и материаловедения. Дело в том, что традиционное представление атомной структуры кристаллов не всегда подходит для использования в конкретных физических моделях. Исключение составляют лишь данные о пространственной группе симметрии конкретных кристаллов, которые по существу являются общими интегральными характеристиками больших множеств кристаллических веществ.

Все большую актуальность приобретает поиск количественных характеристик, которые характеризовали бы отдельные интегральные особенности атомного строения кристаллических тел, но, в то же время, учитывали особенности строения отдельных кристаллов или небольших множеств, сходных по химическому составу и атомному строению кристаллических материалов.

В последние годы ряд авторов для описания и сравнения некоторых характеристик кристаллов, которые, определяются атомной структурой кристаллов, используют понятие *дескрипторов*, имея в виду различные количественные характеристики атомных, химических и других свойств кристаллов [1]. Условно, используемые сегодня дескрипторы, можно разделить на *физико-химические*, которые описывают особенности физических и (или) химических свойств кристаллов и *структурные*.

Важнейшей особенностью инструментария, основанного на введении и использовании структурных дескрипторов является возможность их вычисления непосредственно с использованием современных банков структурных данных: CCDC, ICSD и т.д. Учитывая объём этих данных, отдельной актуальной задачей является возможность использования современной техники параллельных вычислений и суперкомпьютерной техники при вычислении и анализе структурных дескрипторов [2].

Одним из фундаментальных вопросов кристаллографии является вопрос о частоте реализации различных групп симметрии в мире кристаллов. Так, например, в группах симметрии $P1$, $P\bar{1}$ и $P2_1/c$ кристаллизуется основная масса известных органических и элементоорганических кристаллов. Наряду с этим существуют, группы симметрии, в которых кристаллизуется совсем небольшое число кристаллов. Такие группы принято называть «редкими».

В частности, для ответа на этот вопрос нами были предложены дескрипторы симметричного кристаллического пространства, основанные на оценке доли запрещённых для заселения областей, возникающих в этом пространстве за счёт наличия симметрии [3]. Было показано, что «редкие» пространственные группы симметрии молекулярных кристаллов характеризуются более высокой долей удельного запрещённого объёма по сравнению с группами симметрии, в которых кристаллизуется большое число молекулярных кристаллов. Высокая доля запрещённых областей в кристаллическом пространстве позволяет, в общем случае, реализовываться только кристаллам с большими элементарными ячейками. Реализация упаковок с меньшей элементарной ячейкой возможна в случае, если симметрия структурной единицы включает симметрию класса симметрии кристаллического пространства [4].

Исследования запрещённых областей в кристаллическом пространстве являются фундаментом для нового взгляда на упаковку молекулярных кристаллов. Кроме того, расширение представления об упаковке кристаллов может оказаться полезным при решении ряда практических задач, например, позволит заранее исключить некоторые способы упаковки молекул в кристалле при проектировании новых кристаллических материалов с заданной атомной структурой. В любых задачах моделирования кристаллических структур невозможно обойти стороной ограничения, которые накладывают запрещённые области на расположение атомов и молекул в кристалле.

Авторами предложены два новых дескриптора для описания координационных полиэдров в реальных атомных структурах. Вычисление предложенных дескрипторов основано на информации о координатах атомов, составляющих координационный полиэдр, и на функции распределения электронной плотности координационного полиэдра [5]. Предложенные дескрипторы количественной оценки искажений координационных полиэдров позволяют унифицировать процедуру кристаллохимического анализа. Количественный подход в совокупности с автоматизацией процедуры определения вида координационного полиэдра позволяет существенно расширить возможности современного кристаллохимического анализа. Так появляется возможность сравнивать искажения координационного полиэдра как с «правильным» полиэдром, так и с любым другим координационным полиэдром, принятым в качестве эталона в данном случае.

Алгоритмы вычисления представленных в данной работе структурных дескрипторов реализованы в виде программного обеспечения ЭВМ и находятся в свободном доступе [2, 6].

Список использованной литературы

1. Arockiaraj M. et al. Quantitative structural descriptors of sodalite materials // *Journal of Molecular Structure*. 2021. Vol. 1223. P. 128766.
2. Сомов Н. В., Чупрунов Е. В. Программа PseudoSymmetry для исследования псевдосимметрии атомных структур кристаллов // *Кристаллография*. 2014. Т. 59, № 1. С. 151-153.
3. Сомов Н. В., Чупрунов Е. В. О запрещенных позициях в кристаллическом пространстве // *Кристаллография*. 2018. Т. 63, № 3. С. 353-357.
4. Сомов Н. В., Чупрунов Е. В. О распределении молекулярных кристаллов органических и элементоорганических соединений по пространственным группам симметрии // *Кристаллография*. 2021. Т. 66, № 3. С. 381-387.
5. Somov N.V., Chausov F.F., Kazantseva I.S. et al. Isomorphous series of heterometallic complexes $\text{Na}_4[\text{Cu}_x\text{Co}_{(1-x)}\{\text{N}(\text{CH}_2\text{PO}_3)_3\}] \cdot 13\text{H}_2\text{O}$ and $\text{Na}_4[\text{Cu}_x\text{Zn}_{(1-x)}\{\text{N}(\text{CH}_2\text{PO}_3)_3\}] \cdot 13\text{H}_2\text{O}$ ($x = 1 \dots 0$): Synthesis and structural characterization by analysis of 3d-metal coordination polyhedra as compared with isodimorphous series $\text{Na}_4[\text{Cu}_x\text{Ni}_{(1-x)}\{\text{N}(\text{CH}_2\text{PO}_3)_3\}] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ // *Polyhedron*. 2021. Vol. 195. P. 114964.
6. Сомов Н.В. Комплекс программ PseudoSymmetry, [Электронный ресурс], Режим доступа: <http://www.phys.unn.ru/ps/>.

КОМБИНАТОРНЫЕ ТИПЫ ФУЛЛЕРЕНОВ C_{20} - C_{60} С 4-ЧЛЕННЫМИ ЦИКЛАМИ

Д.Г. Степенщиков¹, С.М. Аксенов²

¹Геологический институт, ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты

²Лаборатория арктической минералогии и материаловедения

ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты

stepen@geoksc.apatity.ru, aks.crys@gmail.com

Аннотация. Получено и охарактеризовано точечными группами симметрии полное комбинаторное разнообразие C_{20} - C_{60} фуллеренов с 4-членными циклами, рассматриваемых как простые многогранники с 4-, 5- и 6-угольными гранями.

Ключевые слова. Фуллерен, комбинаторный тип, точечная группа симметрии.

Пожалуй, сегодня нет необходимости пояснять специалистам в области химии, физики, кристаллографии и даже геологии, что такое фуллерены – подробные обзорные работы по этим молекулярным структурам были многократно опубликованы разными авторами, начиная с 1980-х гг. и по настоящее время, постоянно пополняясь новыми данными [1-3]. В зависимости от конкретного исследования широта этого термина ограничивается лишь некоторым набором его свойств. В данной работе, носящей кристаллографический характер, под (4,5,6)-фуллереном мы будем понимать выпуклый полиэдрический простой (т.е. в каждой вершине сходится ровно три ребра) многогранник, на котором помимо обычных 5- и 6-угольных также разрешены 4-угольные грани. Теоретическое изучение фуллеренов с 4-членными циклами, показало, что они вполне могут быть стабильными, а потому реально существующими структурами [4,5]. Далее кратко опишем авторский способ получения комбинаторного многообразия (4,5,6)-фуллеренов и результаты.

Ранее нами было получено полное комбинаторное многообразие фуллеренов C_{20} - C_{60} [6]. Этот «классический» и сравнительно небольшой диапазон охватывает все структуры (всего 5770) от единственного минимально возможного додекаэдрического фуллерена C_{20} до 1812 изомеров C_{60} , среди которых – исторически первая экспериментально

открытая стабильная молекула – бакибол. Им и было решено ограничиться для начального получения (4,5,6)-фуллеренов.

Для введения 4-угольной грани в (4,5,6)-фуллерен нами была использована федоровская β -операция (рисунок 1 *a*). Она применяется ко всем ребрам (в том числе и любого ранее полученного (4,5,6)-фуллерена), концы которых не примыкают к 6-угольным граням, чтобы избежать появления 7-угольников. При этом из изомера C_n получается изомер C_{n+2} , поэтому при вычислениях дополнительно рассматривались (4,5,6)-фуллерены класса C_{18} , чтобы соответствующий класс C_{20} был полон.

Предварительные вычисления показали, что не все (4,5,6)-фуллерены могут быть получены с помощью β -операции, а именно структуры с тремя попарно смежными 4-угольными гранями. Для них была введена дополнительная операция, которая на место вершины, в которой сходится три 4-угольных грани, помещает новые три попарно смежные 4-угольные грани (рисунок 1 *b*). При этом из изомера C_n получается изомер C_{n+6} , поэтому в рассмотрение необходимо также ввести (4,5,6)-фуллерены из классов C_{14} и C_{16} , чтобы классы C_{20} и C_{22} были полны.

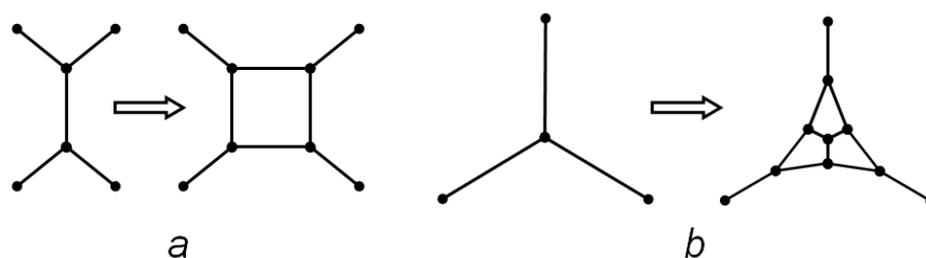


Рисунок 1. *a* – β -операция добавления 4-угольной грани, *b* – операция добавления тройки попарно смежных 4-угольных граней.

Эти две операции оказались достаточны для получения всех (4,5,6)-фуллеренов. Результаты расчетов показаны в Таблице 1. Краткий ее анализ показывает ожидаемое подавляющее преобладание асимметричных структур, а также наличие запрещенных для обычных фуллеренов комбинаторных типов с т.г.с. D_4 , D_{4d} , D_{4h} , O и O_h .

п.г.а.	1		2		3		4				6			8			10		12			16			20			24				48	120	Σ
т.г.с.	C_1	C_2	C_s	C_i	C_3	C_{2v}	C_{2h}	D_2	S_4	D_3	C_{3v}	C_{3h}	D_{2h}	D_{2d}	D_4	D_5	D_{3h}	D_{3d}	T	D_{4h}	D_{4d}	D_{5h}	D_{5d}	D_{6h}	D_{6d}	T_d	O	O_h	I_h					
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31				
20	3	4	5			1		1		1			2	3			1	1											1	23				
22	9	9	4			8					2																			32				
24	20	13	10			8		2					2	1						1					1			1	59					
26	40	17	20		1	11				1							3												93					
28	72	31	29		1	6	1	4			1		4	3												1			153					
30	139	34	37			16				1							1					2							230					
32	224	59	58		2	8	4	6		2			2	2			2	2			2							1	374					
34	382	64	62		2	23					3																		536					
36	598	93	82			19	4	10	1	1			3	5			1	1						2					820					
38	931	98	105		2	30				3	3						3												1175					
40	1370	163	131	1	3	35	5	12			4		3	2						2		1	2			1			1735					
42	2044	155	176			39				1							3												2418					
44	2908	241	202	1	2	33	8	20	3	5	1	1	5	5			3	4	1										3443					
46	4149	241	268		6	43					4																		4711					
48	5748	384	328	3	1	29	8	17		1	1		6	5	1		1	1			2			1	2				6539					
50	7980	331	363		7	58				6	1						3					2							8751					
52	10751	555	437	5	8	38	9	27	1		4		9	9					1										11854					
54	14580	471	504		1	67				2	1						3												15629					
56	19230	754	603	3	10	76	19	32		8			6	5			2	4		2						1	1		20756					
58	25455	660	719		12	72					6																		26924					
60	33099	1030	775	7		64	16	43	2	4	1		9	12		1	2	1					1	2				1	35070					

Таблица 1. Распределение (4,5,6)-фуллеренов C_{20} - C_{60} по порядкам групп автоморфизмов (п.г.а) и точечным группам симметрии (т.г.с.), приведенным в символикe Шенфлиса.

В заключение отметим, что фуллереновые структуры активно изучаются не только среди углеродных, но и других соединений, например, кремниевых [7], полиоксаметаллатных [8,9], борно-азотных [10] и.т.д., что открывает широкие перспективы для новых исследований.

Список использованной литературы

1. Sokolov V.I., Stankevich I.V. The fullerenes – new allotropic forms of carbon: molecular and electronic structure, and chemical properties // RUSS CHEM REV. 1993. 62(5), 419-435. doi.org/10.1070/RC1993v062n05ABEH000025
2. Fowler P.W., Manolopoulos D. E. An atlas of fullerenes. Oxford: Clarendon Press, 1995. 392.
3. P. Schwerdtfeger, L.N. Wirz, J. Avery. The topology of fullerenes // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. 2015. 5. 96-145. doi.org/10.1002/wcms.1207
4. Gao Y.D., Herndon W.C. Fullerenes with four-membered rings // Journal of the American Chemical Society. 1993. 115. 18. 8459-8460. doi.org/10.1021/ja00071a070
5. A.I. Melker, Krupina M.A., Matvienko A.N. Nucleation and growth of fullerenes and nanotubes having four-fold symmetry. Materials Physics and Mechanics. 2021. 47. 315-343. doi.org/10.18149/MPM.4722021_13
6. Voytekhovskiy Y.L., Stepenshchikov D.G. C₂₀ to C₆₀ fullerenes: combinatorial types and symmetries // Acta Crystallographica. 2001. A57. 736-738. doi.org/10.1107/S0108767301012363
7. Fthenakis Z.G., Havenith R.W.A., Menon M., Fowler P.W. Study of the Si fullerene cage isomers // Journal of Physics: Conference Series 10. 2005. 117–120. doi.org/10.1088/1742-6596/10/1/029
8. Forbes T.Z., McAlpin J.G., Murphy R., Burns P.C. Metal-Oxygen Isopolyhedra Assembled into Fullerene Topologies // Angewandte Chemie International Edition. 2008. 47(15). 2824-2827. doi.org/10.1002/anie.200705563
9. Sigmon G.E., Unruh D.K., Ling J., Weaver B., Ward M., Pressprich L., Simonetti A., Burns P.C. Symmetry versus Minimal Pentagonal Adjacencies in Uranium-Based Polyoxometalate Fullerene Topologies // 2009. 48(15). 2737-2740. doi.org/10.1002/anie.200805870

10.Shakirova E.I., Kuznetsov V.V. Effect of Chemical Composition of Fullerenes on the Structure and Internal Rotation Barrier of Encapsulated Ammonia Borane Molecule // Zhurnal Obshchei Khimii. 2019. 89. 11. 1712-1718. doi.org/10.1134/S1070363219110112

ПОЛИМОРФИЗМ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ НА ДВА ПЕНТАМИНО ОДИНАКОВОЙ ФОРМЫ

Д.А. Суворова¹

¹*студент, Владимирский государственный университет
имени А. Г. и Н. Г. Столетовых, Владимир
suvorova3199@mail.ru*

научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. кафедры ФМОиИТ К.А. Потехин

Аннотация. В разбиениях плоскости на два одинаковых по форме пентамино обнаружено несколько серий полиморфных модификаций. Для 13-ти разбиений, выполнено сравнение решеток трансляций, структурных классов, координационных чисел, последовательностей длин границ между базисным полимино и полимино его первой координационной сферы. В этой серии полиморфных модификаций обнаружены разбиения близнецы.

Ключевые слова. Разбиения плоскости на полимино, полиморфные модификации.

Пентамино – это полимино, которое состоит из 5-ти квадратов. Каждый из этих квадратов имеет хотя бы одну общую сторону с остальными.

Для получения симметрически независимых разбиений плоскости на два одинаковой формы пентамино (далее «разбиений») был использован алгоритм, предложенный А.В.Малеевым [1].

Существует 83 варианта таких разбиений, в которых мы обнаружили 10 вариантов пентамино, отличающихся друг от друга по форме. Следовательно, среди 83-х вариантов разбиений имеются такие разбиения, в которых пентамино имеют одну и ту же форму. Эти разбиения называются полиморфными модификациями друг друга.

Для анализа мне была предложена одна из десяти серий полиморфных модификаций разбиений. Эта серия полиморфных модификаций состоит из 13-ти вариантов разбиений.

Девять вариантов разбиений (69%) относятся к структурному классу p_2 , $Z=2(1)$. К структурному классу p_g , $Z=2(1)$ относятся три варианта разбиений. К структурному классу p_1 , $Z=2(1,1)$ относится лишь один вариант разбиений этой серии полиморфных модификаций. В реальных кристаллических структурах двухорбитные системы также встречаются гораздо реже, чем одноорбитные.

Как правило, полиморфные модификации имеют разные решетки трансляций. Тем не менее, среди 13-ти разбиений мы обнаружили три разбиения, которые имеют не только одну и ту же решетку трансляций, но и относятся к одному и тому же структурному классу. Такие разбиения мы предлагаем называть «разбиения близнецы».

Кроме решеток трансляций и структурных классов можно использовать первую координационную сферу базисного полимино. Между базисным полимино и каждым полимино его первой координационной сферы должна существовать общая ненулевая граница. Первая координационная сфера может содержать 4, 5 или 6 полимино.

Для некоторых разбиений близнецов мы обнаружили разные координационные числа. Следовательно, их можно отличить друг от друга, используя этот геометрический параметр. В то же время, мы обнаружили три разбиения близнеца (№47, №52 и №55), в каждом из которых первая координационная сфера состояла из пяти пентамино. Поэтому, для того чтобы отличить эти три разбиения друг от друга, необходимо было исследовать еще один геометрический параметр.

В качестве нового геометрического параметра можно предложить последовательность длин границ между базисным полимино и полимино его первой координационной сферы. Длина границы складывается из единичных отрезков. Роль единичного отрезка играет ребро элементарной ячейки исходной квадратной решетки трансляций. Для разбиений на пентамино длина границы между двумя пентамино может изменяться от 1 до 5. Использование этого нового геометрического параметра позволило нам установить, что разбиение №55 отличается от двух других. Однако, для двух оставшихся разбиений (№47 и №52), этот параметр оказался одинаковым. На рисунке 1 показаны фрагменты этих двух разбиений. У этих разбиений одинаковые решетки трансляций, одинаковые плоские

группы симметрии, одинаковые координационные числа и одинаковые последовательности длин границ: 4,2,3,1,2. Тем не менее, это два разных разбиения.

В качестве доказательства, что разбиения №47 и №52 это два разных разбиения можно использовать тот факт, что в разбиении №52 имеется фрагмент, состоящий из двух пентамино (на рис.1 б он указан заливкой), которого нет в разбиении №47.

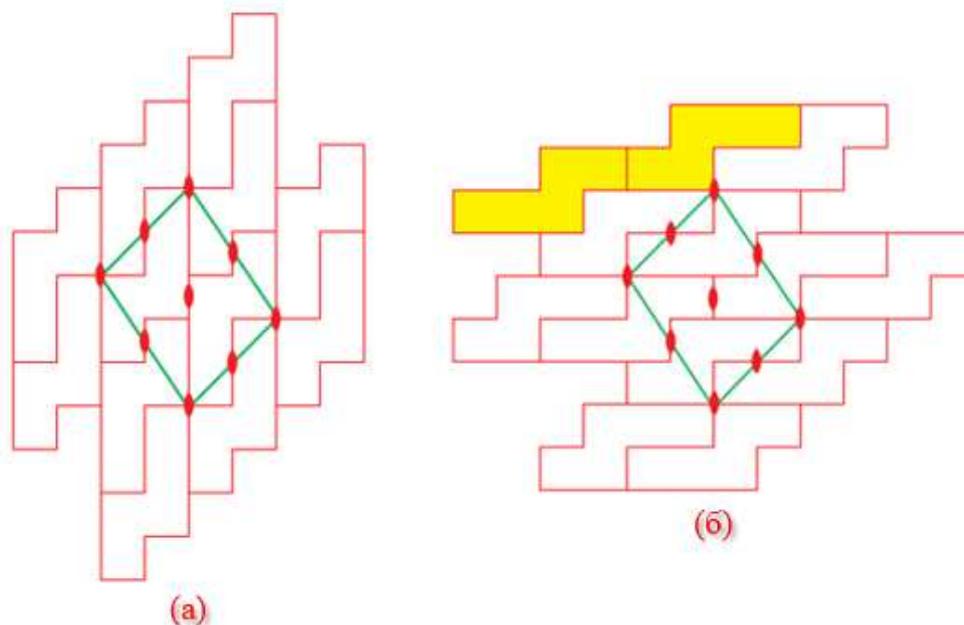


Рисунок 1. Фрагменты разбиений №47 (а) и №52 (б)

Выводы

1. Доказано существование полиморфных модификаций изоэдральных разбиений плоскости на два одинаковых по форме пентамино.

2. Среди полиморфных модификаций изоэдральных разбиений плоскости на два одинаковых по форме пентамино обнаружены разбиения близнецы. У разбиений близнецов одинаковые решетки трансляций, структурные классы и даже координационные числа.

Список использованной литературы

1. Малеев А.В. Алгоритм и программа перебора разбиений плоскости на полимино // Кристаллография. 2001. Том 46, № 1. С. 165-167.

НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИММЕТРИИ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ САМОСБОРКУ СТРУКТУР (БИО)ПОЛИМЕРОВ, АППРОКСИМИРУЕМЫХ ЦЕПЯМИ ПРАВИЛЬНЫХ ТЕТРАЭДРОВ

А.Л. Талис¹

¹ИНЭОС РАН им. А. Н. Несмеянова, Москва

talishome@mail.ru

Аннотация. Берущая начало от Платона идея геометризации физики позволяет рассматривать спирали (био)полимеров как 3-мерные евклидовые реализации конструкций алгебраической геометрии. Развиваемый подход позволил (с точностью до 2%) определить структурные параметры α -спирали и объяснить ее универсальность в белках. Также априори были определены закономерности строения углеводородных цепей фосфолипидов.

Ключевые слова. Некристаллографическая симметрия, биополимеры.

Для спиральных (био)полимеров, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, в качестве универсальной строительной единицы определен тетраблок – 7-вершинное объединение по граням 4-х правильных тетраэдров, которое реализуется в линейном (правом и левом) и плоском вариантах. Группа симметрии линейного тетраблока изоморфна проективной специальной линейной группе $PSL(2,7)$ порядка 168 - группе автоморфизмов минимальной конечной проективной плоскости или плоскости Фано [1]. Плоскость Фано является частью более общей комбинаторной конструкции - матроида Фано [2]. Некристаллографическую симметрию спирали (био)полимера определяет схема: матроид Фано – 8-мерная решетка E_8 – группа симметрии линейной подструктуры E_8 . Спираль с винтовой осью 40/11 (вращение на $11 \times 360^\circ / 40 = 99^\circ$) из слегка деформированных тетраблоков является структурной основой α -спирали (полипептидной цепи белков). Она позволяет (с точностью до 2%) определить структурные параметры α -спирали [3] и объясняет ее универсальность в белках [4].

Строительными единицами тетракоординированной (углеводородной) цепи фосфолипидов биомембран являются (7+7)-вершинный составной тетраблок (объединение двух конгруэнтных тетраблоков - условно “белого” и “черного”) и (7+7-3)-вершинный декорированный тетраблок (объединение “белого” тетраблока и “черного” тетраэдра), в вершинах которых сходятся 1 или 4 ребра. Бихроматический граф составного тетраблока задается 13 знаками инцидентности, находящимися на пересечении столбца и строки таблицы инцидентности матроида Фано [2,5]. Знаку инцидентности соответствует ребро между белой (столбец) и черной (строка) вершинами графа. Неэквивалентные подтаблицы этой таблицы инцидентности определяют “конформационные” варианты графа составного тетраблока, которые в рамках “С, Н” – реализации определяют граф бутана в трех (транс, гош⁺ и гош⁻) конформациях. Для декорированного тетраблока все подтаблицы эквивалентны и задают граф пропана [5]. Законы объединения матроидов Фано (или производных от него матроидов) задаются самим исходным матроидом [2], что определяет самоорганизацию матроидных цепей («кирпич является и архитектором»), а значит и соответствующих им углеводородных цепей фосфолипидов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания №075-00697-22-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список использованной литературы

1. Талис А.Л., Рабинович А.Л., Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров, Кристаллография, 64, 341 (2019).
2. Johnson S. L. A Dual Fano and Dual Non-Fano Matroidal Network. California State University, San Bernardino, (2016).
3. Samoylovich M. I., Talis A. L., Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures, Acta Crystallographica, A70, 186 (2014).
4. Sadoc J., Rivier N, Boerdijk-Coxeter helix and biological helices, Eur. Phys. J. B12, 309 (1999).
5. Рабинович А.Л., Талис А.Л., Структурная единица для описания некристаллографической симметрии углеводородных цепей – компонентов молекул фосфолипидов, Известия РАН. Серия физическая, 85, 1116 (2021).

РЕШЕТЧАТЫЕ И ИЗОЭДРАЛЬНЫЕ РАЗБИЕНИЯ ПЛОСКОСТИ НА ДВА ГЕКСАМИНО

К.Ю. Чаюн¹

¹студент, Владимирский государственный университет

имени А. Г. и Н. Г. Столетовых, Владимир

kirillchayun2001@yandex.ru

научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. кафедры ФМОиИТ К.А. Потехин

Аннотация. На основе алгоритма А. В. Малеева получены решетчатые и изоэдральные разбиения плоскости на два гексамино. Для разбиений указаны типы решеток трансляций (косоугольная, прямоугольная примитивная, прямоугольная центрированная). Рассчитаны параметры (a , b и γ) элементарных ячеек этих решеток трансляций. Среди всех разбиений отобраны те, в которых присутствуют симметрично эквивалентные гексамино (322 разбиения). Выбранные разбиения распределены по параметрам решеток трансляций и структурным классам.

Ключевые слова. разбиения плоскости на полимино, параметры элементарной ячейки решетки трансляций, подрешетки решетки трансляций, плоские группы симметрии, локальные группы симметрии.

Уже существуют алгоритмы построения разбиений плоскости на полимино (например, алгоритм А. В. Малеева [1], создающий разбиения плоскости на полимино заданной площади, не зная форму этого полимино). Как правило, для полученных разбиений плоскости на полимино указывают тип разбиения (решетчатые, изоэдральные, неизоэдральные) и, иногда, плоскую группу симметрии. В то же время, пока отсутствуют данные о решетках трансляций и параметрах элементарных ячеек этих разбиений.

Для исследования решеток трансляций и расчета параметров элементарных ячеек нами были выбраны решетчатые и изоэдральные разбиения плоскости на два гексамино.

В целях генерации разбиения плоскости на два гексамино необходимо выявить все симметрически независимые подрешетки квадратной решетки трансляций (квадратной сетки), у которых площадь элементарной ячейки в 12 раз больше площади элементарной ячейки

исходной квадратной решетки. Таких подрешеток ровно 10. Их коды, согласно [1], тип решетки трансляций и параметры приведенной элементарной ячейки представлены в таблице 1.

Номер подрешетки	Код подрешетки	Тип решетки трансляций	Параметры элементарной ячейки решетки	Количество разбиений
1	$12\ 1_1$	прямоугольная примитивная	$a = \sqrt{2}, b = 6\sqrt{2}, \gamma = 90^\circ$	22
2	$12\ 1_2$	косоугольная	$a = \sqrt{5}, b = \sqrt{29}, \gamma \approx 85^\circ$	34
3	$12\ 1_3$	косоугольная	$a = \sqrt{10}, b = 4, \gamma \approx 72^\circ$	39
4	$12\ 1_4$	косоугольная	$a = 3, b = \sqrt{17}, \gamma \approx 76^\circ$	39
5	$12\ 1_5$	прямоугольная примитивная	$a = 2\sqrt{2}, b = 3\sqrt{2}, \gamma = 90^\circ$	45
6	$12\ 1_6$	прямоугольная центрированная	$a = 2, b = 12, \gamma = 90^\circ$	19
7	$6\ 2_0$	прямоугольная примитивная	$a = 2, b = 6, \gamma = 90^\circ$	33
8	$6\ 2_2$	прямоугольная центрированная	$a = 2\sqrt{2}, b = 6\sqrt{2}, \gamma = 90^\circ$	29
9	$6\ 2_3$	прямоугольная центрированная	$a = 4, b = 6, \gamma = 90^\circ$	29
10	$4\ 3_0$	прямоугольная примитивная	$a = 3, b = 4, \gamma = 90^\circ$	33

Таблица 1. Результаты определения типа решетки трансляций исследуемых разбиений плоскости

Среди всех разбиений плоскости на два гексамино были отобраны только те, в которых гексамино имели одинаковую форму, т.е. являлись симметрично эквивалентными по отношению друг к другу. В соответствии с этим условием обнаружено 322 симметрически независимых разбиения плоскости («рисунка»). Их количественное распределение по указанным выше подрешеткам квадратной решетки трансляций также приведено в таблице 1.

В результате анализа сформированных разбиений установлено, что не существует ни одного разбиения плоскости на два гексамино одинаковой формы, которые описывались бы квадратной решеткой трансляций с параметрами элементарной ячейки $a = b = 2\sqrt{3}$ и $\gamma = 90^\circ$.

Наибольшее число разбиений плоскости (составляет более 10 % от общего числа данных разбиений) на симметрично эквивалентные гексамино реализуется в прямоугольных примитивных решетках трансляций с параметрами элементарной ячейки решетки, где $a = 2\sqrt{2}$, $b = 3\sqrt{2}$, $\gamma = 90^\circ$.

Каждое из полученных разбиений плоскости на два гексамино одинаковой формы, может быть описано с использованием плоской группы симметрии. Помимо плоской группы симметрии для всех разбиений плоскости можно указать количество гексамино, содержащихся в элементарной ячейке, а также точечную группу симметрии позиции, которую занимают кристаллографически независимые гексамино. Так каждому из образованных разбиений плоскости будет поставлен в соответствие структурный класс. Результаты распределения представлены в таблице 2.

Структурный класс	Количество разбиений
$p1, Z = 2 (1,1)$	16
$p2, Z = 2 (1)$	197
$p2, Z = 2 (2,2)$	5
$pm, Z = 2 (1)$	1
$pm, Z = 2 (m,m)$	1
$pg, Z = 2 (1)$	56
$cm, Z = 4 (1)$	11
$pmg2, Z = 2 (2)$	3
$pmg2, Z = 2 (m)$	12
$pgg2, Z = 2 (2)$	14
$cm2, Z = 4 (m)$	6

Таблица 2. Распределение разбиений плоскости на два симметрично эквивалентных гексамино по структурным классам

В ходе анализа данных установлено, что более 60 % сформированных разбиений плоскости на два симметрично эквивалентных гексамино относятся к структурному классу $p2, Z = 2 (1)$.

Из 16 вариантов разбиений плоскости, которым соответствует структурный класс $p1$, $Z = 2$ (1,1), четыре разбиения имеют локальные плоскости скользящего отражения (рис. 1), а три – локальные плоскости зеркального отражения (рис. 2).

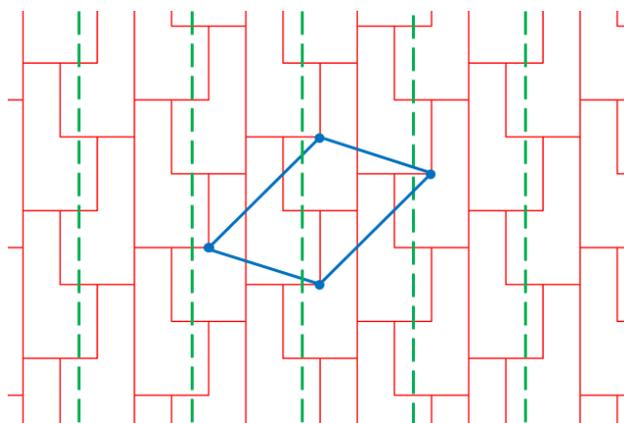


Рисунок 1. Локальные плоскости скользящего отражения в разбиении № 67

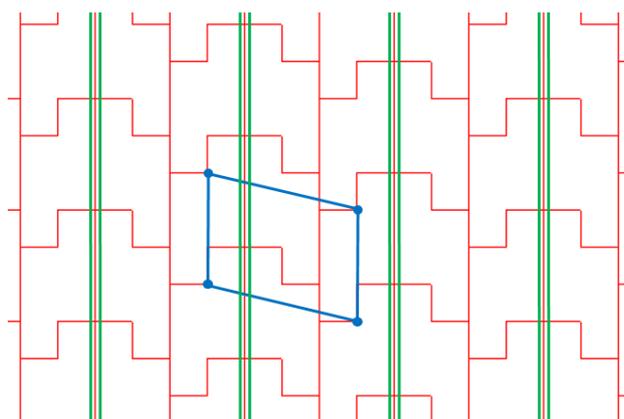


Рисунок 2. Локальные плоскости зеркального отражения в разбиении № 105

Среди 322 симметрически независимых разбиений плоскости на два симметрично эквивалентных гексамино 22 разбиения плоскости являются двухорбитными, т.е. в элементарной ячейке решетки трансляций таких разбиений имеется два симметрически независимых гексамино, каждому из которых соответствует своя правильная система точек.

Список использованной литературы

1. Maleev A. V. An algorithm and program of exhaustive search for possible tiling of a plane with polyominoes // Crystallography reports. 2001. Т. 46, № 1. С. 154 – 156.

МОДЕЛЬ ПОСЛОЙНОГО РОСТА: ИСТОРИЯ, РЕЗУЛЬТАТЫ, ОТКРЫТЫЕ ПРОБЛЕМЫ

А.В. Шутов¹

¹*Владимирский государственный университет*
a1981@mail.ru

Аннотация. В докладе приводится краткий исторический обзор исследований, связанных с моделью послойного роста разбиений и графов, в первую очередь полученных при участии А.В. Малеева, а также упоминается ряд важных нерешенных задач.

Ключевые слова. Разбиения, графы, форма роста.

В докладе приводится обзор исследований, связанных с моделью послойного роста разбиений и графов, в первую очередь полученных при участии Андрея Владимировича Малеева, а также упоминается ряд важных нерешенных задач. В силу ограниченности объема текста, обзор не претендует на полноту, в том числе на полноту библиографических ссылок.

Модель послойного роста впервые появилась в конце 90-ых годов прошлого века на кафедре теоретической физики тогда еще Владимирского государственного педагогического университета. Данная модель может быть описана следующим образом:

Пусть дано некоторое разбиение двумерного (трехмерного) пространства на многоугольники (многогранники). Выделим в ней некоторое конечное множество многоугольников (многогранников), условно называемое затравкой. Далее индуктивно определим координационные окружения: первое координационное окружение состоит из многоугольников (многогранников), соседних с затравкой. Каждое следующее координационное окружение состоит из многоугольников (многогранников), соседних с предыдущим окружением, но не входящих в ранее построенные окружения.

Экспериментальное исследование координационных окружений периодических разбиений показало, что асимптотически они ведут себя самоподобным образом и имеют предельную форму роста – некоторый выпуклый центрально-симметричный многоугольник (многогранник). Это

позволило рассматривать данную модель в качестве простой геометрической модели роста и формообразования кристаллов [1].

Далее возникли вопросы о математическом обосновании данного наблюдения и об априорном вычислении формы роста. С этими вопросами физики обратились на кафедру алгебры и теории чисел. Задача вызвала интерес и автор этих строк (будучи студентом второго курса) был одним из размышлявших над ней. В результате в 2000 году В.Г.Журавлев получил решение этой задачи в случае двумерных периодических разбиений. При этом им было показано, что модель послойного роста более логично формулировать на языке графов (где она превращается в задачу изучения окружности в естественной метрике графа). Результаты были опубликованы в работе [2]. Многомерное обобщение было получено автором в 2001 году в своей курсовой работе, но достаточно долго оставалось неопубликованным. В дальнейшем данные результаты неоднократно переоткрывались в других работах [3,4].

Далее автором этих строк было предложено рассмотреть послойный рост одного семейства плоских графов с элементами случайности, что должно было интерпретироваться как модель роста кристаллов с примесями. Было получено «доказательство» многоугольной формы роста, однако на кафедральном семинаре в нем была найдена ошибка. Присутствовавший на семинаре Андрей Владимирович Малеев заинтересовался задачей и создал компьютерную программу, моделирующую послойный рост в рассматриваемом случае. Проведенные эксперименты окончательно похоронили надежду исправить доказательство, так как показали, что форма роста в этом случае не является многоугольной. При исследовании модели был получен целый ряд частичных результатов и сформулированы общие гипотезы [5], однако задача и по сей день остается нерешенной.

В последующие годы был получен ряд дальнейших результатов в модели послойного роста. В частности, автором изучался рост 1-периодических графов – структур, сочетающих периодичность в одном направлении со случайностью в другом. Был получен ряд частичных результатов в этом направлении, но итоговая задача осталась нерешенной. Также на кафедре теоретической физики обсуждались дальнейшие физические следствия полученных результатов.

Примерно в это же время на кафедре алгебры и теории чисел возник интерес к изучению так называемых множеств ограниченного остатка –

задачи, вроде бы никак не связанной с моделью послойного роста. При изучении этой задачи внимание В.Г.Журавлева привлек фрактальный объект, открытый французским математиком Жераром Рози. На одном из семинаров В.Г.Журавлев рассказал о возможности построения квазипериодического разбиения плоскости на основе фрактала Рози. Разумеется, возник вопрос о форме роста этого разбиения. На протяжении последующих лет В.Г.Журавлевым и А.В.Малеевым был проведен цикл экспериментальных и теоретических исследований в данном направлении. Разбиение Рози оказалось очень интересным и богатым на структуры. Исследованию его свойств было посвящено 7 работ, опубликованных в журнале «Кристаллография». Еще две работы, посвященные родственным структурам были опубликованы в престижном международном журнале «Acta Crystallographica». Тем не менее, исходная задача о форме роста разбиения Рози в настоящее время остается нерешенной.

Полученные результаты вошли в докторскую диссертацию А.В.Малеева. После защиты диссертации исследования были продолжены в нескольких направлениях:

1. Изучение обратной задачи, то есть описание многогранников, которые могут быть получены в качестве форм роста.
2. Изучение чисел многогранников в координационных окружениях. Данный объект известен в кристаллографии как координационные числа и играет большую роль при исследовании ряда реальных кристаллических структур, например цеолитов.
3. Изучение форм роста квазипериодических разбиений и графов.

Некоторое представление о результатах, полученных в данных направлениях, можно составить по книге [7] и обзору [8].

В настоящее время исследования продолжаются. В частности, недавно удалось решить задачу о форме роста для целого семейства квазипериодических разбиений – так называемых мультигрид разбиений [9]. Остаются и нерешенные задачи, например, почти ничего не известно о формах роста так называемых самоподобных разбиений.

Отметим, что задача о форме роста не является изолированной. Она связана с другими свойствами разбиений и графов: координационными числами и топологической плотностью, описанием кластеров в квазипериодических разбиениях и функцией сложности разбиений, симметриями подобия и т.д. Кроме того, возникающая при решении этих задач техника неожиданно оказалась связанной с целым рядом чисто

математических объектов и задач: линейные диофантовы уравнения, теория равномерного распределения, теория алгебраических чисел и группы Галуа, комбинаторика слов, перекладывания отрезков и т.д.

Физические приложения модели послойного роста включают в себя предсказание структуры нанокристаллов, изучение кластеров в кристаллических структурах, изучение физических и химических свойств (энергия решетки, каталитическая активность и т.д.), изучение движения частиц в кристаллах и т.д. Недавно были обнаружены связи форм роста с плотностью состояний оператора Шредингера.

Список использованной литературы.

1. Рау В.Г., Журавлев В.Г., Рау Т.Ф., Малеев А.В. Морфогенезис кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок. // Кристаллография. 2002. Том 47. С. 793--796.
2. Журавлев В. Г. Самоподобный рост периодических разбиений и графов // Алгебра и анализ. 2002. Том 13. Вып. 2. С. 69--92.
3. Akiyama S., Saalim J., Imai K., Kaneko H. Corona limits of tilings: periodic case // Discrete Comput. Geom. 2019. Vol. 61. P. 626--652.
4. Fritz T. Velocity polytopes of periodic graphs and a no-go theorem for digital physics // Discrete Math. 2013. Vol. 313. P. 1289--1301.
5. Журавлев В.Г., Малеев А.В., Рау В.Г., Шутов А.В. Рост случайных графов и упаковок. // Кристаллография. 2002. Том 47. С. 976--981.
6. Rauzy G. Ensembles a restes bornes // Seminaire de theorie des nombres de Bordeaux 1983/1984. Bordo. 1984. Expose 24.
7. Малеев А.В., Шутов А.В. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов. Владимир. Транзит-Х. 2011.
8. Shutov A., Maleev A. Mathematical Model of Layer-By-Layer Growth of Packings, Tilings and Graphs. Layer-by-Layer Deposition. Development and Applications. Editor: Eve A. Milne. Nova Science Publishers, Incorporated. 2020. P. 123-182.
9. Demski D., Hilgers P., Shutov A. Growth forms of grid tilings // Acta Crystallographica. 2022. Vol. A78. P. 309-318.

GROWTH PROCESSES IN GRID TILINGS

Peter Hilgers¹

¹*Hasenbergweg 9, 76275 Ettlingen, Germany*

peter.hilgers@posteo.de

Introduction. A tiling T is a covering of plane or space by finitely many types of polygonal or polyhedral figures which overlap only on their boundaries. There are various methods to construct non-periodic tilings, here the grid method is used which was introduced by de Bruijn (1981) in the case of the Penrose tiling. It was widely generalised to obtain 3D quasiperiodic tilings with icosahedral and arbitrary symmetry. The main advantage of the method is that it allows to construct not only point sets, but to find tiles directly. This is beneficial especially in the 3D case and the grid method is employed to study quasicrystals (Socolar 1986, Madison 2020, Boyle 2022).

The growth of quasicrystals is still not yet fully understood (Steurer 2018), computer simulations have been performed using rhombic or rhombohedral tiles (Onoda 1988, Hann 2016). Here I investigate growth processes in grid tilings.

Grid Tilings

I will use the following construction: Let $\{g_1, \dots, g_N\}$ be a family of N unit vectors in d -dimensional Euclidean space. Choose also N real parameters γ_i which serve as phase shifts. The N -grid L_N is a union of N arrays of equidistant parallel hyperplanes in R^d :

$$L_N = \{x \in R^d : (x, g_i) - \gamma_i \in Z\} \quad (\text{step 1}).$$

Here (\bullet, \bullet) is a scalar product and $1 \leq i \leq N$. If there is no point where more than d grid hyperplanes intersect, the grid is called **regular**. Note that the grid will be regular for almost all values of γ_i .

The N -grid L_N defines some tiling of the d -dimensional space, but this tiling is “bad” because the number of tile types is infinite. A key idea of the grid method is to consider the tiling dual to L_N in some sense. Define N functions K_i and function K as follows:

$$K_i(x) = \min\{n \in Z : n \geq (x, g_i) - \gamma_i\} \quad (\text{step 2}),$$

$$K(x) = \sum_{i=1}^n K_i(x) g_i \quad (\text{step 3}).$$

Informally $K_i(x)$ is the index of the hyperplane perpendicular to g_i through x . It can be proved that $K(x)$ is constant on tiles of L_N . So, K maps the set of tiles of L_N to a discrete set Λ in R^d . The set Λ is a set of vertices of some d -dimensional tiling Til that is called **grid tiling**. To define this tiling one must describe edges connecting points from Λ . The rule is as follows: Two points of Λ are connected by an edge if and only if corresponding tiles of L_N have a common edge (step 4).

Furthermore, the set of all tiles of L_N sharing some fixed vertex is mapped (under K) to the set of all vertices of some tile of the grid tiling. In the 3D case the grid tiles are parallelepipeds.

The construction of a 2D tiling is exemplarily illustrated in Figure 1 for $N = 4$ and $d = 2$.

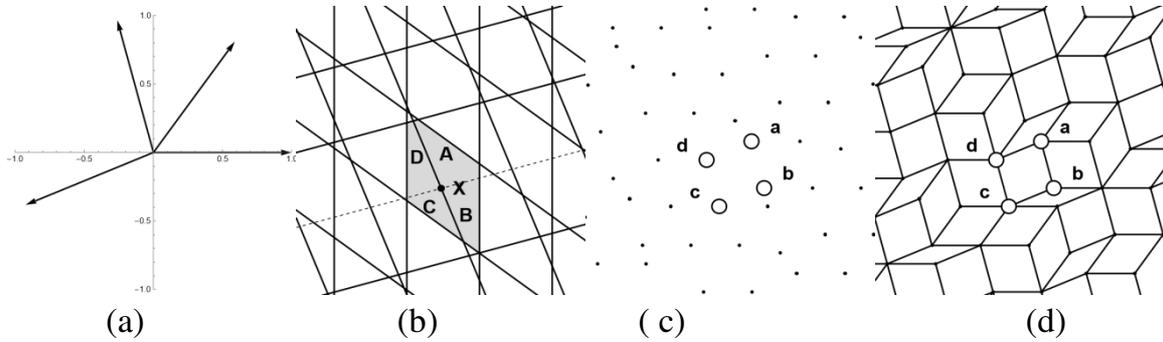


Figure 1. Construction of a grid tiling: (a) grid vectors g_i , (b) 4-grid L_N (step 1) with intersection point X and adjacent tiles A, B, C, D ; dotted line for hyperplane through X and perpendicular to g_3 , (c) vertices Λ of the dual tiling (steps 2, 3) with $A \leftrightarrow a, B \leftrightarrow b, C \leftrightarrow c, D \leftrightarrow d$, (d) edges of dual tiling (step 4)

Coronas and Growth Forms

A patch P_0 is a finite set of tiles in T . The first **coordination shell** P_1 of P_0 consists of all tiles which are adjacent to a tile of P_0 . In the n -th coordination shell P_n are all tiles adjacent to P_{n-1} that are not in P_{n-2} . Here we abstain from giving a formal definition of **growth form**, also known as **corona limit**, and instead refer to Demski (2022). Informally the definition may be given as “outer contour, scaled by $1/n$ ”, or

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{n}$$

if it exists, compare Figure 2.

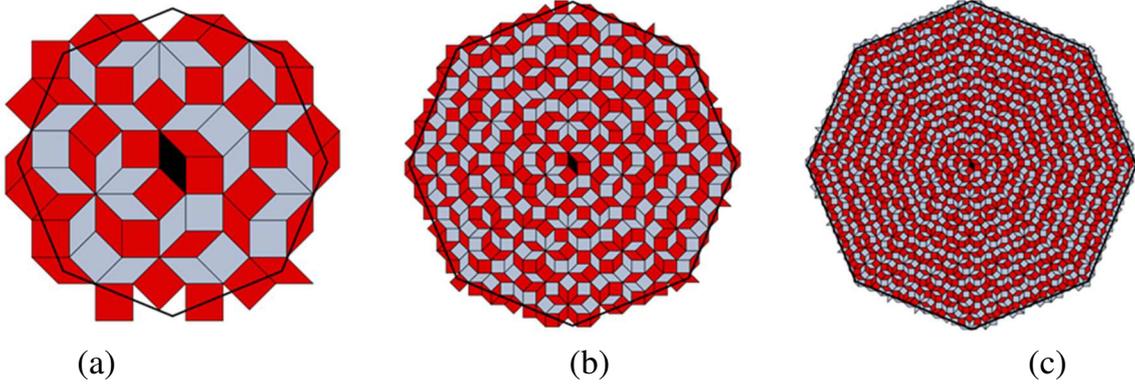


Figure 2. Initial patch P_0 , growth form of Ammann-Beenker tiling (black line) and (a) $n=5$ corona, (b) $n=15$ corona, (c) $n=30$ corona; all tiles scaled by $1/n$.

It is known that all periodic tilings do have a growth form, which is some polygon or polyhedron (Akiyama 2019) and we know also that the growth form does not depend on the selected initial patch. For non periodic tilings growth forms have been found in special cases (Shutov, Maleev 2019).

Theorem and Method to Calculate 2D and 3D Growth Forms

Now consider a regular N -grid tiling Til produced by vectors $\{g_1, \dots, g_N\}$. Let $\{e_1, \dots, e_N\}$ be the standard orthonormal base of N -dimensional space. Let O_N be a boundary of the convex hull of the vectors $\pm e_i$. The polytope O_N is known as N -dimensional cross-polytope or as N -dimensional orthoplex. Consider the projections

$$\pi_1 : R^N \rightarrow R^d \quad \text{defined as} \quad \pi_1(t) = \pi_1((t_1, \dots, t_N)) = \sum_{i=1}^N t_i g_i \quad \text{and}$$

$$\pi_2 : R^N \rightarrow R^{N-d},$$

an orthogonal projection to the $(N-d)$ -dimensional plane $\pi_2(t) = 0$.

Let P be the d -dimensional plane $\pi_2(t) = 0$. Then for any regular grid tiling the growth form exists and is given by $\pi_1(O_N \cap P)$. For proof and computational details see Demski (2022).

Generalisations

Grid tilings used to study quasicrystals exploit grids that are non regular and/or non periodic (Socolar 1986, Boyle 2022). The most common non periodic grids are of the Fibonacci type where the position of the N -th line of any given grid from the origin is given by

$$x_N = N + \alpha + 1/\tau [N/\tau + \beta]$$

with $\lfloor \cdot \rfloor$ the floor function. Extensive computer simulations suggest that also these tilings have a growth form. In special cases the growth form of a regular, non periodic grid tiling seems to be identical to the one of corresponding regular, periodic grid (Figure 3a).

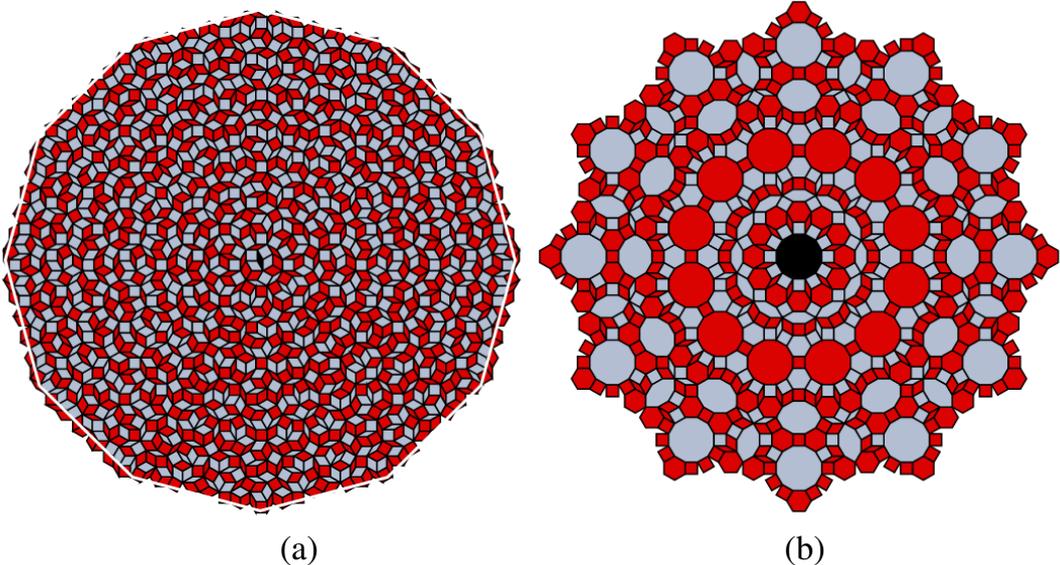


Figure 3. (a) Initial patch P_0 black, conjectured growth form of regular, non periodic grid (white line) and $n = 28$ corona; (b) Initial patch P_0 black, $n = 12$ corona of non periodic, non regular grid tiling. All tiles scaled by $1/n$.

Computer experiment also suggest that some growth forms are non-convex, (Figure 3b, 4). However, it is not known, under which conditions convex or non convex forms occur.

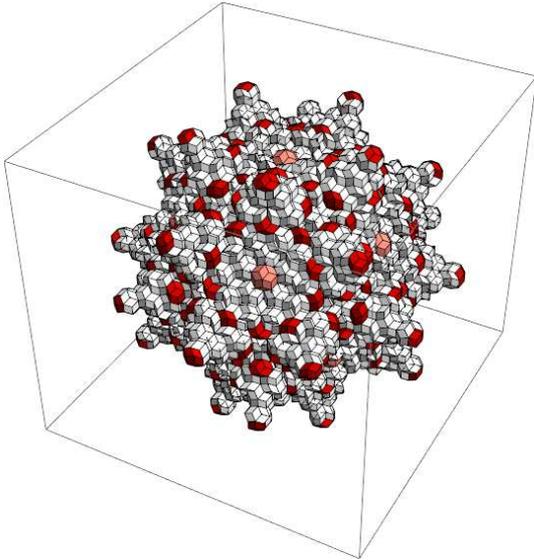


Figure 4. $n = 14$ corona of tiling to non regular periodic grid, 6 grid vectors derived from dodecahedron.

References

2. S. Akiyama, J. Caalim, K. Imai, H. Kaneko. “Corona Limits of Tilings: Periodic Case.” *Discrete and Computational Geometry*, vol. 61, no. 3, 2019, pp. 626-652
3. L. Boyle and P. J. Steinhardt. “Coxeter Pairs, Ammann Patterns and Penrose-like Tilings”, *Phys. Rev. B*, vol. 106, 2022, 0144113
4. N.G. de Bruijn. “Algebraic theory of Penrose’s non-periodic tilings of the plane.” *Kon. Nederl. Akad. Wetensch. Proc. Ser. A*, vol 84, 1981, pp.35-48
5. D. Demski, P. Hilgers, and A. Shutov. “Growth forms of grid tilings.” *Acta Crystallographica A*, vol. 78, no. 4, 2022, pp. 309-318,
6. C. Hann, J.E. Socolar and Paul.J. Steinhardt “Local growth of icosahedral quasicrystalline tilings”, *Phys. Rev. B*, vol 94, 2016, 014113,
7. D. Levine and P.J. Steinhardt. “Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures.” *Phys Rev. Lett.* vol. 53, 1984, p. 2477
8. A.E. Madison and P.A. Madison, “Structure of icosahedral quasicrystals with the multiple-cell approach” *Structural Chemistry* vol. 31, 2020. pp 485-505
9. G.Y. Onoda, P.J. Steinhardt et al, „Growing Perfect Quasicrystals.” *Phys Rev. Lett.* vol. 60, 1988, p. 2653-2656
10. A.V. Shutov and A.V. Maleev. “Study of Penrose Tiling Using Parameterization Method.” *Crystallography Reports*, vol. 64, no. 3, 2019, pp. 351-361
11. A.V. Shutov and A.V. Maleev. “Layer-by-Layer Growth of Ammann-Beenker Graph.” *Crystallography Reports*, vol. 64, no. 6, 2019, pp. 851-856
12. J.E. Socolar and P. J. Steinhardt. „Quasicrystals. II. Unit-cell Configurations.” *Physical Rev. B* vol. 34, No. 2, 1986, pp 617-647
13. W. Steurer. “Quasicrystals: What do we know? What do we want to know? What can we know?” *Acta Crystallographica A*, vol. 74, 2018, pp 1-11. 4

Научное электронное издание

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ
И РОДСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ

Материалы всероссийской конференции с международным участием
памяти д.ф.-м.н. А. В. Малеева
14 – 15 декабря 2022 г.

Издается в авторской редакции

За содержание, точность приведенных фактов и цитирование
несут ответственность авторы публикаций

Системные требования: Intel от 1,3 ГГц; Windows XP/7/8/10;
Adobe Reader; дисковод CD-ROM.

Тираж 8 экз.

Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых
Изд-во ВлГУ
rio.vlgu@yandex.ru

Кафедра физико-математического образования и информационных технологий
albina.mokrova@yandex.ru