ОБОЗРЕНИЕ
ПРИКЛАДНОЙ И ПРОМЫШЛЕННОЙ
Том 26 МАТЕМАТИКИ Выпуск 1
2019

А. Л. Т а л и с, **А. Л. Р а б и н о в и ч** (Москва, ИНЭОС РАН; Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН)**. Алмазоподобный 4-мерный многогранник {240} как основа описания некристаллографической симметрии линейных тетракоординированных структур: составные тетраблоки.**

Отображение некристаллографической симметрии линейной цепи, образованной одинаковыми правильными тетраэдрами, объединенными по граням, дает [1–4] тетраблок, — максимально-возможное линейное объединение тетраэдров (4-х), сохраняющее количество (7) вершин при отображении в 3-мерное евклидово пространство E^3 из разбиений на правильные тетраэдры 3-мерных пространств постоянной положительной кривизны S^3 (120-вершинного многогранника — политопа $\{3,3,5\}$) [5] и постоянной отрицательной кривизны H^3 (гиперболических сот $\{3,3,6\}$) [6].

Тетраблок реализуется в двух энантиоморфных (правом и левом линейном, группа симметрии которых изоморфна проективной специальной линейной группе PSL(2,7)) и одном неэнантиоморфном (плоском, группа симметрии которого изоморфна группе PGL(2,7)) вариантах; центром линейного тетраблока называется вершина, общая для всех тетраэдров [3, 4], центром плоского — середина ребра, общего для всех тетраэдров. При описании некристаллографической симметрии линейных тетракоординированных структур по аналогии с тетраэдрическими цепями возникает вопрос о поиске некоторой идеальной структуры, в которой окружение каждой вершины является максимально симметричным, а тетракоординированная цепь — ее линейной подструктурой. Такой структурой является только энантиоморфный 240-вершинный многогранник — «политоп $\{240\}$», 4-мерный аналог алмаза на 3-мерной сфере S^3 [7, 8], порядок группы его симметрии 2880. Политоп $\{240\}$ можно представить в виде объединения двух конгруэнтных [7] (условно, «белого» и «черного») политопов $\{3,3,5\}$ на одной сфере S^3, в котором вершины белого политопа расположены в центрах тетраэдров черного, и наоборот [5,7]. Свойство политопа $\{240\}$: белый политоп $\{3,3,5\}$ может быть переведен в черный $\{3,3,5\}$ любой осью 2-го порядка C_2, проходящей перпендикулярно середине любого ребра между белой вершиной и ближайшей черной; ось совмещает белый тетраэдр вокруг черной вершины с черным тетраэдром вокруг белой вершины [5,7]. Поэтому политоп $\{240\}$ можно назвать белым политопом $\{3,3,5\}$, который «декорирован» [8] черным политопом $\{3,3,5\}$. Базовая симметрийная структурная единица для тетракоординированных цепей, по аналогии с тетраблоком для тетраэдрических цепей, должна быть выявлена из анализа отображения в E^3 подструктур политопа $\{240\}$. Вследствие указанного строения политопа $\{240\}$ она должна представлять собой такую комбинацию белого и черного тетраблоков (т.е. *комбинированный* тетраблок), которая обладает наибольшей возможной симметрией. Это означает, что каждая белая вершина комбинированного тетраблока должна быть тетракоординированной черными вершинами или являться частью белого тетраэдра, тетракоординирующего черную вершину; аналогичное требование — для каждой черной вершины. Количество черных вершин, декорирующих 7 вершин белого тетраблока (т. е. связанных ребрами с его вершинами) в комбинированном тетраблоке, не может превышать 7 (т. е. количества вершин черного тетраблока). Структура политопа $\{240\}$ не позволяет объединить линейно два плоских варианта тетраблока, поэтому существуют только две возможности. *Тетраблок-I: два линейных тетраблока (черный и белый).* Определяется объединением двух ближайших тетраблоков в политопе $\{240\}$, центры которых (белый и черный) соединены ребром. Согласно свойствам политопа $\{240\}$, черный линейный тетраблок должен совмещаться осью 2-го порядка C_2 с белым тетраблоком, что однозначно определяет все 7 вершин черного тетраблока. Совместно с белым тетраблоком он образует *составной* линейный тетраблок (7+7=14 вершин), его группа симметрии изоморфна группе PSL(2,7) $\cdot C_2$. *Тетраблок-II: линейный (белый) и плоский (черный) тетраблоки.* Центр белого линейного тетраблока в политопе $\{240\}$, как и любая белая вершина политопа, является центром тетраэдра из черных вершин. Белый линейный тетраблок, декорированный таким черным тетраэдром, представляет собой часть *составного* тетраблока. Черные вершины этого тетраэдра можно соединить ребрами; из них только одно ребро соединяет те вершины, которые являются центрами двух крайних (торцевых) тетраэдров белого линейного тетраблока. Середина этого ребра расположена *наиболее близко* к центру белого тетраблока, поэтому именно оно является общим ребром всех тетраэдров [1-4] черного плоского тетраблока, который декорирует данный белый линейный тетраблок. Из пяти остальных черных вершин плоского тетраблока (они лежат в плоскости, которая перпендикулярна этому общему ребру [1–4]) 2 вершины принадлежат исходному черному тетраэдру, декорирующему центр белого линейного тетраблока, а 3 вершины (более удаленные от центра белого линейного тетраблока) не могут оказаться вершинами какого-то *одного* черного тетраэдра, в центре которого окажется белая вершина комбинированного тетраблока.

В итоге тетраблок-II — это *декорированный* тетраблок, так как он сводится к декорированию белого тетраблока только частью черного, — тетраэдром из черных вершин вокруг центра белого тетраблока. При этом все 7 вершин линейного белого тетраблока декорируют ту или иную вершину этого черного тетраэдра, и *декорированный* тетраблок имеет 7+4=11 вершин. *Составной* и *декорированный* тетраблоки отображаются из S^3 в E^3 с сохранением количества вершин и ребер.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ, гос. зад. КарНЦ РАН № 0218-2019-0076.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Талис А. Л.*, *Рабинович А. Л.* Базовая единица структур, допускающих аппроксимацию цепями правильных тетраэдров, и ее теоретико-групповое обоснование. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2018, т. 25, в. 2, с. 184–185.
2. *Рабинович А. Л.*, *Талис А. Л.* Универсальность тетраблока как основа общего подхода к отображению некристаллографической симметрии углеводородных цепей. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2018, т. 25, в. 2, с. 180–181.
3. *Талис А. Л.*, *Рабинович А. Л.* Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров. — Кристаллография, 2019, т. 64, в. 3, с. 341–350.
4. *Talis A. L.*, *Rabinovich A. L.* Acta Cryst. A., 2019, submitted.
5. *Coxeter H. S. M.* Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973, 321 p.
6. *Görner M.* Regular tessellation links. — arXiv:1406.2827v3 [math.GT], 2016.
7. *Mosseri R.*, *DiVincenzo D. P.*, *Sadoc J. F.*, *Brodsky M. H.* Polytope model and the electronic and structural properties of amorphous semiconductors. — Phys. Rev. B, 1985, v. B32, № 6, p. 3974–4000.
8. *Ishii Y.* Propagating local positional order in tetrahedrally bonded system. — Acta Crystallogr. Sect. A, 1988, v. 44, part 6, p. 987–998.