

А. Л. Рабинович, А. Л. Талис (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН; Москва, ИНЭОС РАН). **Углеродно-подобные цепи с некристаллографической симметрией и комбинированные тетраблоки.**

Некристаллографическую симметрию линейной цепи из объединенных по граням одинаковых правильных тетраэдров можно отобразить с помощью 7-вершинного линейного объединения 4-х тетраэдров, — тетраблока [1,2]. Его линейные варианты обладают группой симметрии порядка 168, изоморфной группе $\text{PSL}(2,7)$ [3], плоский вариант — группой, изоморфной группе $\text{PGL}(2,7)$ (ее порядок 336) [1,2]. Если эта цепь содержит в себе 30 тетраэдров и может быть строго вложена в триангулированный тор из политопа $\{3, 3, 5\}$ (разбиения на 600 тетраэдров 3-мерной сферы S^3 в 4-мерном евклидовом пространстве E^4 [4, p.247]), то, при сохранении положений 30 вершин тора, возможны 2 варианта спиралей из тетраблоков [5].

Вариант 1: удаление 5 равноотстоящих друг от друга троек ребер оставляет 20 из 30 тетраэдров, что дает спираль из 5 тетраблоков (содержащих $5 \cdot 4 = 20$ тетраэдров), соединенных по торцевым вершинам [5]. Переход в S^3 от такой замкнутой тетраблочной спирали к соответствующей ей замкнутой тетракоординированной цепи осуществляется переходом от тетраблоков к составным (14-вершинным) тетраблокам [6]. Высокосимметричной структурой, содержащей такую цепь [7, 8] («охватывающей» конструкцией), является политоп $\{240\}$ [4,6,9], который может быть представлен как объединение двух конгруэнтных [9] политопов $\{3, 3, 5\}$ на одной сфере S^3 . Если один из них условно «белый», а второй «черный», то вершины черного политопа $\{3, 3, 5\}$ центрируют 120 тетраэдров белого политопа $\{3, 3, 5\}$, и наоборот. Хотя политоп $\{240\}$ содержит в себе замкнутую цепь из 5 составных тетраблоков, но группа симметрии этой цепи определяется произведением групп $D_5 \cdot \text{PSL}(2,7)$, не принадлежащим группе симметрии политопа.

При отображении тетракоординированных цепей из политопа $\{240\}$ в E^3 наивысшей некристаллографической симметрией обладает 48-вершинная незамкнутая цепь из 4-х составных тетраблоков, объединенных по торцевым вершинам [7, 8]. Эта цепь — «шаблон», реализация которого зависит от типов атомов в вершинах. Например, если это атомы углерода C и водорода H , то он отвечает насыщенной «углеродно-подобной» цепи типа $C_{16}H_{32}$ [7, 8].

Вариант 2: удаление 6 ребер, равноотстоящих друг от друга, оставляет 24 из 30 тетраэдров, что дает спираль из 6 тетраблоков (содержащих $6 \cdot 4 = 24$ тетраэдра), соединенных по торцевым ребрам [5].

Необходим вариант конфигурации с наибольшей возможной симметрией [6], полученный в результате перехода от (условно) белых тетраблоков, объединенных по ребрам, к комбинированным тетраблокам [6].

Примыкающие друг к другу по общему торцевому ребру два комбинированных тетраблока могут быть: *составными*; *составным и декорированным*; *декорированными* (типы описаны в [6]). Как в составном, так и в декорированном тетраблоке торцевые тетраэдры белых тетраблоков всегда центрированы черными вершинами [6], но угол, образуемый белой вершиной торцевого ребра и двумя ближайшими к ней черными вершинами, оказывается нететраэдрическим. По этой причине белые вершины торцевого ребра не могут быть в центрах тетраэдров из черных вершин, что наруша-

ет исходные требования, обусловленные поиском наибольшей возможной симметрии линейной тетракоординированной структуры [6].

Поиск возможности формирования фрагмента с более высокой симметрией вынуждает исключить из искомой структуры обе вершины торцевого ребра. Наиболее близкими друг к другу в объединении двух комбинированных тетраблоков оказываются те 2 черные вершины, которые центрируют белые торцевые тетраэдры (ребра между этими черными вершинами и исключенными белыми также исключены). У каждой из этих черных вершин сохраняется по 2 ребра с белыми вершинами своего комбинированного тетраблока (с тетраэдрическими углами), а объединение двух таких тетраблоков возможно только введением ребра между этими черными вершинами, — оно перпендикулярно торцевому (исключенному) ребру двух белых тетраблоков и принадлежит перпендикулярной этому ребру плоскости, проходящей через его середину. В этой же плоскости лежат и оба ребра, соединяющие каждую из двух рассматриваемых черных вершин с двумя белыми вершинами своего комбинированного тетраблока. Объединение двух рассматриваемых черных и четырех белых вершин формирует в итоге плоский «шаблон». Хотя в этом фрагменте тетраэдрическая (T_d) симметрия не достигается, возникает симметрия тригональная (C_{3v}). Реализация шаблона зависит от типов атомов в вершинах. Например, если это атомы углерода C и водорода H , то этот шаблон отвечает фрагменту с двойной связью « $C-CH=CH-C$ » в ненасыщенной углеводородной цепи. Высокосимметричной структурой, содержащей такую цепь, является политоп $\{720\}$, представляющий собой 120-вершинный политоп $\{3, 3, 5\}$, в котором центрированы все 600 тетраэдров [10]; порядок его группы симметрии равен 14400.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Талис А. Л., Рабинович А. Л.* Симметрия структур, аппроксимируемых цепями правильных тетраэдров. — Кристаллография, 2019, т. 64, в. 3, с. 341–350.
2. *Talis A. L., Rabinovich A. L.* Acta Crystallogr. Sect. A, 2019, submitted.
3. *Martin P., Singerman D.* The geometry behind Galois' final theorem. — European J. Combin., 2012, v. 33, is. 7, p. 1619–1630.
4. *Coxeter H. S. M.* Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973, 321 p.
5. *Талис А. Л., Рабинович А. Л.* Тетраблок и тетраэдрические цепи с «некристаллографической» симметрией. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2018, т. 25, в. 3, с. 280–282.
6. *Талис А. Л., Рабинович А. Л.* Алмазоподобный 4-мерный многогранник 240 как основа описания некристаллографической симметрии линейных тетракоординированных структур: составные тетраблоки. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2019, т. 26, в. 1, с. 92–94.
7. *Рабинович А. Л., Талис А. Л.* Неклассическая симметрия углеводородных цепей липидов биомембран (теоретические подходы и компьютерное моделирование). — В сб.: Олигомеры–2017. Сборник трудов XII Международной конференции по химии и физикохимии олигомеров. (Черноголовка, 16–21 октября 2017 г.) Пленарные лекции. Т. 1. / Под ред. М. П. Березина. Черноголовка, ИПХФ РАН, 2017, с. 135–161.
8. *Рабинович А. Л., Талис А. Л.* Структура и динамика молекулярных систем. Сб. статей, В. XXV. М.: ИФХЭ РАН, 2018, с. 125–135.
9. *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.
10. *Sadoc J. F., Mosseri R.* The E8 lattice and quasicrystals. — J. Non-Crystall. Solids, 1993, v. 153–154, p. 247–252.