

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). **Расслоение Хопфа для 4-мерного многогранника {240} и линейные тетракоординированные цепи.**

Многогранник (политоп) {240} — это конечный 4-мерный аналог алмазоподобной структуры, он содержит 240 вершин, которые принадлежат 3-мерному пространству постоянной положительной кривизны — сфере S^3 [1]. В каждой вершине этого 4-мерного многогранника сходятся 18 гексациклов в конформации «скрученная ванна», т. е. он обеспечивает плотнейшее из всех возможных тетракоординированное окружение каждой вершины [1]. Политоп {240} является объединением двух копий правильного 4-мерного многогранника, имеющего 120 вершин (политоп {3, 3, 5}) [1]; все вершины обеих копий лежат на одной и той же сфере, но при этом один многогранник повернут на определенный угол относительно другого.

Решение многих структурных задач требует отображения политоп {240} в 3-мерное евклидово пространство E^3 [1,2]. Сферу S^3 в евклидовом пространстве E^4 можно представить «базой» (сферой S^2 в пространстве E^3), каждой точке которой соответствует «слой» (окружность Вилларсо S^1 [1]); это представляет собой расслоение Хопфа [3]: $S^3 \rightarrow S^2$ (слой S^1).

В дискретном случае политоп {3, 3, 5} из множества точек сферы S^2 выбираются 12 вершин идеального икосаэдра, а на окружности Вилларсо, проходящей через вершину икосаэдра, размещается 10 вершин политоп; таким образом, каждая вершина базы нагружена слоем из 10 точек. Хотя база (икосаэдр) не принадлежит политопу {3, 3, 5}, но этот способ удобен для отображения политоп {3, 3, 5} в пространство E^3 . Треугольная грань икосаэдра соответствует $3 \cdot 10 = 30$ -вершинному геликоиду Коксетера, а 4 грани икосаэдра, охватывающие все его $4 \cdot 3 = 12$ вершин, дают картину расположения геликоидов Коксетера [5–8] в пространстве E^3 (картина является условной, так как для базы все 4 геликоида эквивалентны).

Известен [1] вариант отображения линейной подструктуры политоп {240} в «канал» в E^3 ; стенки такого канала образованы гексациклами в конформации «скрученная ванна». Поскольку выбор подсистемы ребер из множества всех ребер политоп {240} не является однозначным, возможны иные варианты выбора линейных подструктур политоп. Существует вариант, в котором совокупности вершин формируют не «каналы», а цепные последовательности; он представлен в настоящей работе.

Этот вариант позволяет охватить максимально возможное количество вершин политоп {240}. Он необходим, если вершины в итоговой системе должны быть разделены на два типа (условно, типы «С» и «Н»); иными словами, принадлежать тетракоординированным («углеводородно-подобным») цепям «типа $C_n H_{2n}$ ». В политопе {3, 3, 5} максимальный порядок оси есть 30, т. е. в соответствующей цепи может быть только 30 вершин, связанных ребрами [7], поэтому в политопе {240} в соответствующей этой оси тетракоординированной цепи может быть максимум 60 вершин, что ограничивает ее протяженность.

Нами показано, что в политопе {240} можно выделить лишь три 60-вершинные «углеводородно-подобные» цепи типа $C_{20} H_{40}$, и при этом остаются еще 2 совокупности по 30 вершин, образующие при переходе в E^3 геликоиды Бердийка–Коксетера [7,

8]. Показано также, что разбиение такого типа является *единственным*.

Действительно, 60-вершинной «углеводородно-подобной» цепи типа $C_{20}H_{40}$ в политопе $\{240\}$ соответствует 6-вершинное объединение 2-х равнобедренных треугольников базы, которая представляет собой 24-вершинный усеченный октаэдр [4], см. рис. Поэтому расслоение Хопфа позволяет свести задачу к задаче охвата всех вершин *прямого* [9] икосаэдра минимальным количеством треугольников (в *прямом* икосаэдре 8 граней — это равносторонние треугольники, через центры которых проходят оси 3-го порядка, а остальные 12 граней — равнобедренные треугольники [9]). Охват оказывается возможным осуществить либо с помощью 4-х равносторонних треугольников, что соответствует варианту, рассмотренному в [1], и приводит к 4-м «каналам», либо с помощью 1-го равностороннего и 3-х равнобедренных треугольников, что и приводит к результату, указанному нами выше. В последнем случае три тетракоординированные цепи «типа $C_{20}H_{40}$ » скручены друг с другом, подобно геликоидам Бердийка–Коксетера.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (гос. задание КарНЦ РАН №0218-2019-0076, №г.р. АААА-А17-117031710039-3 — для А.Л.Р.).

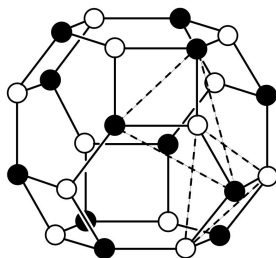


Рис. База расслоения Хопфа для политопа $\{240\}$ как объединение двух прямых икосаэдров (вершины которых показаны черными и белыми шарами, соответственно; центры всех шаров лежат на одной сфере S^2) в усеченный октаэдр (адаптировано из [4]). Штриховыми линиями выделены два равнобедренных треугольника базы («белый» и «черный»); объединение этих треугольников соответствует «углеводородно-подобной» цепи «типа $C_{20}H_{40}$ » в политопе $\{240\}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Ishii Y. Propagating local positional order in tetrahedrally bonded system. — Acta Crystallogr. Sect. A, 1988, v. 44, part 6, p. 987–998.
3. Sadoc F. J. Eur. Phys. J. E., 2001, 5, p. 575–582.
4. Samoylovich M., Talis A. Acta Cryst. A., 2014, 70, p. 186–198.
5. Lord E. A., Ranganathan S. Eur. Phys. J. D., 2001, 15, p. 335–343.
6. Lord E. A. Struct. Chem., 2002, 13, 3-4, p. 305–314.
7. Coxeter H. S. M. Regular Polytopes. N.Y.: Dover Publ., 1973, 321 p.
8. Boerdijk A. H. Philips Res. Rep., 1952, 7, p. 303–313.
9. Галушкин П. В. Материаловедение, 1999, 6, с. 2–5.