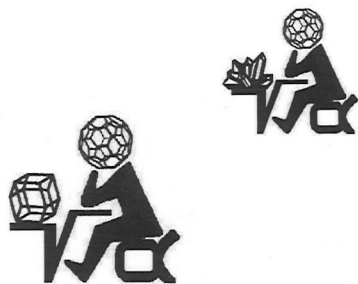


Труды II Всероссийской научной школы

*“Математические исследования
в кристаллографии,
минералогии и
петрографии”*

16-17 октября 2006 г.

г. Апатиты

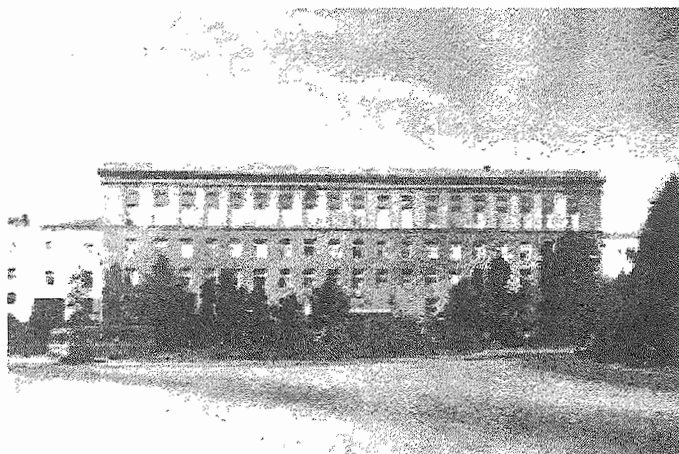


*Геологический институт КНЦ РАН
Кольское отделение РМО*

Труды II Всероссийской научной школы

*“Математические исследования
в кристаллографии, минералогии
и петрографии”*

Апатиты, 16-17 октября 2006 г.



Апатиты, 2006

УДК 548.12 + 549.21 + 552.122

Труды II Всероссийской научной школы “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”. Апатиты, 16-17 октября 2006 г. / Сост. и ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во “К & М”, 2006. – 173 с.

В сборнике представлены доклады, прочитанные на II Всероссийской научной школе “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”, состоявшейся в г. Апатиты 16-17 октября 2006 г. Они объединены идеей упорядоченности, разнообразно проявляющей себя в минеральной и живой природе. Представленные к печати статьи показывают богатый арсенал методических установок и математических подходов, развиваемых авторами.

Сборник представляет интерес для кристаллографов, минералогов, петрографов и биологов, использующих в своих исследованиях математические методы, а также для студентов названных специальностей.

Рекомендовано к печати Ученым советом Геологического института КНЦ РАН и Советом Кольского отделения РМО

Издано при финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью (программа “Поддержка молодых ученых – 2006”) и Кольской научной школы Министерства образования и науки РФ – НШ 2305.2003.5

- © Коллектив авторов, 2006
- © Кольское отделение РМО, 2006
- © Геологический институт КНЦ РАН, 2006

СОДЕРЖАНИЕ

Войтеховский Ю.Л. Открытие школы	5
--	---

Заказные доклады

Долбилин Н.П. Разбиения пространства на многогранники	7
Макаров В.С., Макаров П.В. Правильные разбиения пространств постоянной кривизны и их кристаллографические группы	19
Заренков Н.А. Топология дробления в свете принципа Кюри	33

Секционные доклады

Кристаллография

Дамиан Ф.Л., Макаров П.В. О правильных звездных многогранниках в пространстве Лобачевского	58
Корсков Р.В. Автоматическая обработка фотогномограмм: предварительные результаты	61
Кучериненко Я.В. Разбиения трехмерной сферы и срастания кристаллических зерен	63
Раменская М.Е. Новое о плотнейших шаровых упаковках	73
Смирнова Н.Л. К вопросу о валентности и связности	87
Сотникова Т.Д. Перечисление выпуклых простых 12- ... 25-эдров без 3- и 4-угольных граней	94
Степенщиков Д.Г. О морфологии гиперфуллеренов	99
Ярыгин О.Н. О максимальной грани полиэдра	103

Минералогия и петрография

Гульбин Ю.Л. Статистический анализ задачи стереологической реконструкции размеров зерен в агрегате	108
Каржавин В.К. К истории развития математического моделирования в геохимии и петрологии	114

Макаров М.С. Комбинаторные типы и точечные группы симметрии гранатов г. Круглая, Западные Кейвы, Кольский полуостров	120
Наконечный В.Н., Печенюк С.И. Пространственное моделирование микроструктуры гидро- и ксерогелей оксигидроксидов переходных металлов	124
Ткачев Ю.А. Структура горной породы: опыт формализации	129
Траскин В.Ю., Кучериненко Я.В., Куликов-Костюшко Ф.А., Скворцова З.Н. Связность элементов структуры в поликристаллических материалах, их прочностные и транспортные свойства	136
Войтеховский Ю.Л., Фролов К.И. Классификация петрографических структур по статистикам тернарных контактов минеральных зерен	142

Биология

Войтеховский Ю.Л. Икосаздрические вирусы и фуллерены: два мира, одна геометрия	148
Мельник М.Н. Комбинаторное многообразие шаровых упаковок на сфере	153
Тимофеева М.Г. Организация колоний <i>Pandorina morum</i> (Müll.) Borg – биологическая реализация специального разбиения сферы	156
Хроника	165
Фотоальбом	166

Глубокоуважаемые коллеги,

я рад приветствовать вас в связи с открытием II Всероссийской научной школы “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”, проводимой Геологическим институтом Кольского научного центра РАН и Кольским отделением Российского минералогического общества при финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью и Кольской научной школы Министерства образования и науки РФ – НШ 2305.2003.5.

Наша конференция, задуманная в прошлом году на базе одноименной творческой Лаборатории, состоящей из студентов факультета информатики и прикладной математики Кольского филиала Петрозаводского государственного университета и молодых ученых Геологического института КНЦ РАН, получила известность не только в Мурманской области, но и в обеих столицах. Нас это очень радует, так как показывает устойчивый интерес молодежи к математическим исследованиям в естественных науках и эффективно реализует схему подготовки кадров: университет – аспирантура – Российская академия наук.

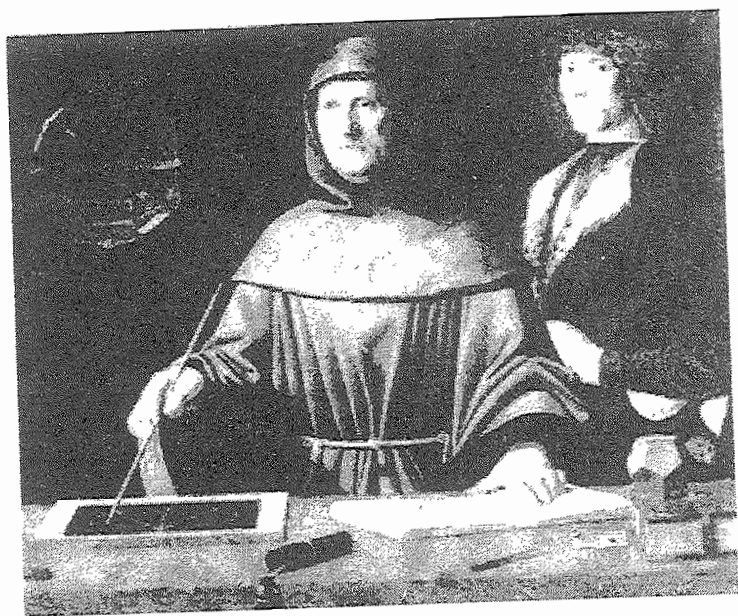
По сравнению с прошлым годом, в тематике нынешней школы усилены кристаллографическое и биологическое направления, чтобы более выпукло показать весь диапазон тем, находящихся в поле зрения – от разбиений кристаллического пространства до организации биологических тканей. Отдана дань и традиционным темам: комбинаторной геометрии выпуклых полиэдров, в т.ч. фуллеренов и их аналогов; компьютерному перечислению и наблюдению в природе реальных кристаллографических простых форм; математической разработке категории петрографической структуры. Несколько докладов приняты к оглашению как поисковые.

Искренне благодарю всех вас за участие в конференции. В первую очередь это касается гостей нашего города. Особую признательность выражаю глубокоуважаемым коллегам, согласившимся выступить перед молодежной аудиторией с пленарными лекциями. На этом позвольте завершить вступительную речь и начать конференцию пленарной сессией, обещающей нам истинное интеллектуальное наслаждение.

**Зам. директора Геологического института КНЦ РАН
Председатель КО РМО, д.г.-м.н., проф.**

Ю.Л. Войтеховский

Заказные доклады



Я. Барбаро (1440-1515). Портрет фра Луки Пачоли (1510).

РАЗБИЕНИЯ ПРОСТРАНСТВА НА МНОГОГРАННИКИ

Н.П. Долбилин. Математический институт РАН, Москва

Введение

Теория разбиений пространства, интенсивно развивающаяся на протяжении последних ста лет, имеет древнюю историю. Проекция правильного многогранника из его центра на описанную сферу является особым случаем правильного разбиения сферы. Полный список платоновых тел – пожалуй, первый в мировой науке пример решенной классификационной задачи из теории правильных разбиений. Правильные разбиения, в основном – плоскости, т.е. разбиения с весьма богатой симметрией, играли до XIX в. серьезную роль в искусстве (например, орнаменты). Мощный толчок развитию теории дала высказанная в первой половине XIX в. гипотеза о правильности внутреннего строения кристаллов (О. Браве, Г. Фробениус, К. Жордан, Е.С. Федоров, Г.Ф. Вороной, А. Шенфлис, Г. Минковский и др.).

В XX в. дополнительный стимул математическому исследованию правильных структур придал Д. Гильберт, сформулировавший в 18-й проблеме несколько важных вопросов о пространственных структурах. В частности, он поставил задачу о существовании подгруппы трансляций конечного индекса в кристаллографической группе, действующей в пространстве любой размерности. Теоретический фундамент кристаллографии был заложен до выдающегося открытия в 1912 г. М. Лауэ дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. В дальнейшем большой вклад в математическую теорию правильных разбиений внесли Б.Н. Делоне, Б.А. Венков, А.Д. Александров, С.С. Рышков и др. В частности, было фактически завершено построение теории параллелоэдров и заложены основы теории стереоэдров. В последней четверти XX в. бурно развивалась теория квазикристаллов, толчок которой дали открытие Р. Пенроузом квазикристаллических узоров (1977 г.) а также полученные Д. Шехтманом и др. реальные структуры с пятиугольной симметрией (1984 г.).

Разбиения пространства

Совокупность замкнутых ограниченных многогранников $T = \{P_1, P_2, \dots, P_k, \dots\}$ называется *разбиением*, если многогранники расположены так, что (1) они попарно не перекрываются (условие упаковки), (2) их объединение есть все пространство (условие покрытия). Многогранники разбиения часто называются *ячейками* или *тайлами*.

В таком виде понятие разбиения слишком общо: в частности, оно включает в себя весьма экзотические разбиения, не используемые в приложениях. Мы

будем рассматривать однородные разбиения (т.е. (r, R) -разбиения), в которых для фиксированных положительных значений r и R каждая ячейка содержит внутри себя шар радиуса r и сама содержится в шаре радиуса R . Очевидно, r -шары попарно не перекрываются и образуют упаковку, а R -шары образуют покрытие пространства.

Разбиение называется *нормальным* (или *грань-в-грань*), если ячейки смежны лишь по целым граням. Так, кирпичная кладка – пример ненормального разбиения. Подходящим подразбиением граней ячеек ненормальное разбиение может быть трансформировано в нормальное.

Важными примерами однородных нормальных разбиений на выпуклые ячейки являются *разбиения Вороного* (в литературе по вычислительной геометрии известны как диаграммы Вороного) и *разбиения Делоне* (другой термин – триангуляции Делоне). Они рассматриваются по отношению к т.н. (r, R) -системам точек. Этот очень естественный класс точечных множеств введен Б.Н. Делоне. В последнее время такие множества называются множествами Делоне [5].

X – *множество Делоне*, если для некоторых положительных r и R выполнены два условия: (r) любой открытый шар радиуса r содержит не более одной точки из X : $|X \cap B_r| \leq 1$, (R) любой замкнутый шар радиуса R содержит не менее одной точки из X : $|X \cap B_R| \geq 1$. Характеристическое свойство множества Делоне: (1) шары радиуса r с центрами в точках из X образуют упаковку; (2) шары радиуса R с центрами в точках из X образуют покрытие пространства.

Строго говоря, множество Делоне есть математическая абстракция. Это *бесконечное* множество точек, простирающееся по всему пространству или плоскости. Действительно, конечное множество расположено в ограниченной части пространства и, следовательно, вне этой части сколь угодно большие шары не содержат ни одной точки из данного множества – условие (R) не выполнено для конечных множеств. Но идея и свойства (r, R) -системы хорошо работают и для конечных множеств, если последние содержат много точек и шары радиуса R с центрами в точках из X покрывают большую (относительно шара радиуса R) область пространства.

Пусть X – множество Делоне и точка $x \in X$, тогда *областью Вороного* называется множество точек y , расположенных к x ближе, чем ко всем остальным точкам системы X : $V_x = \{y \in E^3: |x-y| \leq |z-y|, \forall z \in X, z \neq x\}$. Из r - и R -условий следует, что область Вороного – конечный выпуклый многогранник, содержащийся в шаре радиуса R и содержащий шар радиуса r .

Предложение 1. Пусть X – множество Делоне с параметрами r и R . Множество всех областей Вороного $V(X) = \{V_x \mid x \in X\}$ образует разбиение (Вороного) пространства на многогранники. Разбиение Вороного нормально и однородно. Дано множество Делоне X , выпуклый многогранник D называется многогранником Делоне, если его вершины принадлежат X , лежат на одной сфере S и, кроме вершин, других точек из X нет ни на сфере S , ни внутри нее.

Предложение 2 (“метод пустого шара”, Делоне, 1924). Все многогранники Делоне для заданной (r, R) -системы образуют нормальное разбиение (Делоне) $D(X)$. В отличие от $V(X)$, разбиение $D(X)$ не является однородным. Все многогранники Делоне содержатся в шаре радиуса R , но не обязаны содержать шар некоторого единого для всех ячеек радиуса. Т.е. многогранники в разбиении Делоне для (r, R) -системы могут быть сколь угодно “узкими”.

Теорема. Разбиения Вороного и Делоне метрически дуальны друг другу:

- каждой вершине разбиения Делоне (точке $x \in X$) соответствует многогранник Вороного V_x ;
- каждому ребру Делоне $[x, x']$ соответствует перпендикулярная этому ребру грань разбиения Вороного, общая для многогранников V_x и $V_{x'}$;
- каждой грани Делоне с вершинами $x, x', x'' \dots$ соответствует перпендикулярное к ней ребро Вороного, общее для областей $V_x, V_{x'}, V_{x''} \dots$;
- каждому многограннику Делоне с вершинами $x, x', x'' \dots$ соответствует вершина разбиения Вороного, общая для многогранников $V_x, V_{x'}, V_{x''} \dots$

Подъем разбиений Вороного и Делоне на параболоид

Следующая конструкция сводит вычисления разбиений Вороного и Делоне для множества X к вычислениям выпуклых оболочек множеств для ассоциированного множества X [2].

Пусть X - (r, R) -система на плоскости (x, y) , K – круговой параболоид $z = x^2 + y^2$; $(x, y, 0) \in X$, (x, y, z) – поднятая на параболоид точка; множество всех поднятых точек из X образует на параболоиде K множество X , ассоциированное с X . Далее строятся два бесконечных многогранника. (1) Выпуклая оболочка $\text{Conv } X$ ассоциированного множества X – бесконечный многогранник, вписанный в параболоид. (2) Через каждую точку $(x, y, z) \in X$ проводится плоскость, касательная к параболоиду. Пересечение соответствующих полупространств – бесконечный многогранник $\text{Tan } X$ (от tangent – касательная), описанный около параболоида. (3) Многогранники $\text{Conv } X$ и $\text{Tan } X$ дуальны.

Теорема. При проекции $(x, y, z) \rightarrow (x, y, 0)$ на плоскость $z = 0$: (а) многогранник $\text{Conv } X$ проектируется в разбиение Делоне относительно X , т.е. каждая грань многогранника проектируется в ячейку Делоне для X ; (б) многогранник

Тап X проектируется в разбиение Вороного относительно X , т.е. каждая грань многогранника Тап X проектируется в многогранник Вороного для X .

Доказательство. (а) Пересечение плоскости грани многогранника $\text{Conv } X$ с поверхностью параболоида определяется уравнениями: $z = x^2 + y^2$ и $ax + by + cz = 1$. Подставив z из первого уравнения во второе, получим уравнение кривой на плоскости $z = 0$: $cx^2 + cy^2 + ax + by = 1$. Так как коэффициенты при x^2 и y^2 равны, то это — уравнение окружности. На ней лежат точки $x_1, x_2, x_3 \dots$ из X , в которые проектируются вершины многогранника $\text{Conv } X$, лежащие на пересечении плоскости грани с параболоидом. Внутри окружности нет других точек из X , т.к. внутри шапочки параболоида, отрезаемой плоскостью грани выпуклой оболочки, нет точек из X . Поэтому многоугольник с вершинами $x_1, x_2, x_3 \dots$ является ячейкой Делоне. Доказательство (б) аналогично.

Эта интерпретация разбиений Делоне и Вороного делает совершенно прозрачными алгоритмы построения разбиений Делоне и Вороного. Они систематически изучались в российской геометрической школе (теория параллелоэдров и стереоэдров Вороного).

Моноэдральные разбиения пространства

Разбиение называется *моноэдральным*, если все его ячейки попарно конгруэнтны. Моноэдральное разбиение пространства (плоскости) получается из бесконечного числа копий одного и того же многогранника (многоугольника). Многогранник называется *тайлом*, если из его копий можно собрать разбиение. Примерами тайла являются (на плоскости) любой треугольник или четырехугольник. Дана полная классификация 6-угольных тайлов. Но составление окончательного списка 5-угольных тайлов — нерешенная задача.

Числа Хееша. Пусть дано моноэдральное разбиение плоскости на многоугольники, конгруэнтные многоугольнику M . Все ячейки разбиения, имеющие с M общие граничные точки, образуют *корону радиуса 1*. Все ячейки разбиения, имеющие общие граничные точки с ячейками из короны радиуса 1, в совокупности с короной радиуса 1 образуют *корону радиуса 2*. *Корона радиуса k* состоит из многоугольников короны радиуса $k-1$ и всех других многоугольников разбиения, смежных с первыми. В данном разбиении плоскости имеются короны произвольно большого радиуса. Т.е. из копий тайла M можно собрать корону произвольно большого радиуса.

Обратим вопрос. Пусть дан многоугольник M , о котором неизвестно, является ли он тайлом. Допустим, из его копий можно собрать корону некоторого радиуса n . Можно ли утверждать, что если радиус n очень большой, то из копий многоугольника M можно собрать короны сколь угодно большого радиуса?

Можно ли утверждать, что многоугольник является тайлом? Ответ не известен.

Проблема (Heesch). Для каких r существует многоугольник, обладающий ко-роной радиуса r , но не обладающий короной радиуса $r+1$? Известны выпуклые многоугольники с $r=1$, и невыпуклые многоугольники с $r=5$.

Проблема Хееша примыкает к т.н. *основной проблеме теории разбиений*: дано конечное множество многогранников, существует ли разбиение пространства, выполненное из копий многогранника данного множества? Вонг (Wang, 1961) и Бергер [10] считают, что основная проблема теории разбиений алгоритмически неразрешима. Т.е. нет алгоритма, реализация которого давала бы ответ, существует ли разбиение для данного (любого) множества тайлов. Следующий вопрос остается открытым: *имеется ли верхняя оценка для числа граней трехмерного тайла в монодральном разбиении?*

Группа симметрий разбиения

Пусть T – разбиение и g – движение пространства, переводящее разбиение в себя $gT = T$. Движение g называется *симметрией* разбиения. Множество $\text{Sym } T$ всех симметрий данного разбиения T удовлетворяет условиям группы. Действительно, если g – симметрия разбиения T , то и обратное движение g^{-1} является симметрией. Если движения f и g являются симметриями разбиения T , то их суперпозиция $f \circ g$ также является симметрией. Итак, множество всех симметрий разбиения T является группой и называется *группой симметрий* $\text{Sym } T$ разбиения. Любое разбиение обладает той или иной группой симметрий. Самое общее разбиение обладает тривиальной группой симметрий (состоящей из единственного тождественного движения).

Пусть дана группа G движений пространства и x – точка. Множество образов $G \cdot x = \{gx \mid g \in G\}$ называется *орбитой точки x* относительно группы G . Множество всех движений из G , оставляющих точку x неподвижной, составляют подгруппу группы G , которая называется *стабилизатором точки x* в G и обозначается $\text{Stab}_G(x)$. Замкнутая область F (т.е. некоторая открытая область F' , взятая вместе со своей границей) в пространстве называется *фундаментальной областью* группы G (если такая существует), если (1) любая орбита $G \cdot x$ не имеет более одного представителя в открытой части F' и (2) любая орбита $G \cdot x$ имеет по крайней мере одного представителя в замкнутой области F .

Примеры. (1) G – конечная группа поворотов плоскости вокруг точки O : $G = C_n = \{e, g, g^2, \dots, g^{n-1}\}$, где g – поворот вокруг O на угол $2\pi/n$. Легко проверить, что замкнутый угол $2\pi/n$ с вершиной есть фундаментальная область F

группы. Действительно, он содержит по крайней мере одного представителя из каждой орбиты. В открытом угле (граница удалена) от каждой орбиты может содержаться не более одной точки. (2) G – группа, порожденная параллельными переносами на векторы $e_1 = (1, 0)$ и $e_2 = (0, 1)$, т.е. $G = \mathbb{Z}^2$. Замкнутый прямоугольник $0 \leq x, y \leq 1$ – фундаментальная область группы. Отметим, что фундаментальная область по группе выбирается неоднозначно. Она зависит от выбора представителей орбит. Однозначно корреспондирующим группе G является не фундаментальная область, а *орбифолд*, т.е. пространство или многообразие орбит.

Кристаллографические группы и разбиения

Группа G , действующая в пространстве (плоскости), называется *кристаллографической*, если для нее существует ограниченная фундаментальная область. Это эквивалентно тому, что орбифолд кристаллографической группы является компактным. Никакая фундаментальная область группы S_n не является ограниченной. Группы $\mathbb{Z}^2$ и $\mathbb{Z}^3$ – кристаллографические, действующие на плоскости и в пространстве, соответственно, так как каждая из них имеет ограниченную фундаментальную область. Для ограниченной фундаментальной области F возьмем две константы r_i и R_i такие, что F содержит шар радиуса r_i и, в свою очередь, содержится в шаре радиуса R_i .

Предложение. Орбита $G \cdot x$ есть множество Делоне тогда и только тогда, когда группа G – кристаллографическая. Разбиение T называется *кристаллографическим*, если группа $\text{Sym } T$ – кристаллографическая. Возьмем ячейку P кристаллографического разбиения. Множество ячеек $G \cdot P$ составляет орбиту ячейки P . Бесконечное множество ячеек кристаллографического разбиения рассыпается в конечное (из-за ограниченности фундаментальной области) число орбит.

Теорема (Шенфлис, $d = 3$; Биберах, $d > 3$). Кристаллографическая группа G содержит подгруппу H параллельных переносов (трансляций) конечного индекса $[G:H] = h < \infty$. Конечность индекса h означает, что подгруппа H порождает решетку $\mathbb{Z}^d$ (размерность $d = 2$ в случае плоскости, и $d = 3$ для пространства). Теорема Бибераха [3] явилась ответом на вопрос, поставленный Гильбертом в одной из его знаменитых проблем (18-я проблема). Индекс h ограничивается сверху порядком максимальной конечной группы $(d \times d)$ -матриц. Максимальный порядок равен 12 (порядок симметрии правильного шестиугольника) при $d = 2$ и 48 (порядок симметрии куба) при $d = 3$.

Правильные разбиения: стереоэдры и параллелоэдры

Кристаллографическое разбиение называется *правильным (изоэдральным)*, если группа симметрий действует на множестве ячеек транзитивно, т.е. любая ячейка может быть переведена в любую другую подходящей симметрией. В правильном разбиении каждая из его ячеек окружена другими ячейками одинаково до бесконечности. В правильном разбиении все ячейки попарно конгруэнтны, т.е. оно является моноэдральным. Обратное утверждение неверно: не каждое моноэдральное разбиение является правильным. Выпуклый многогранник (многоугольник) – ячейка правильного разбиения – называется *стереоэдром (планигоном)* [1].

В силу теоремы Шенфлиса-Бибераха, ячейки правильного разбиения рассыпаются в h “решеток” стереоэдров. Стереоэдры из одной решетки не только конгруэнтны, но и параллельны друг другу. Стереоэдр P либо сам является фундаментальной областью, либо содержит некоторое число t фундаментальных областей, где $t = [G : \text{Stab}_P G]$. Особым случаем является $h = 1$, когда все ячейки разбиения параллельны друг другу. Такой специальный тип (выпуклого) стереоэдра, который заполняет пространство параллельными копиями, называется *параллелоэдром*. В разбиении на параллелоэдры группа трансляционных симметрий действует транзитивно на множестве ячеек.

Параллелоэдры – всесторонне изученная область геометрии и геометрической кристаллографии. При $d = 2$ имеется два типа параллелоэдров (двумерные параллелоэдры называются *параллелограммами*): параллелограмм и *центрально-симметричный* 6-угольник. Последний является *примитивным* в том смысле, что в каждой его вершине сходится минимально возможное число – 3 параллелогона. При $d = 3$ все пять типов параллелоэдров найдены Е.С. Федоровым (тела Федорова): параллелепипед (6 граней), центрально-симметричная 6-угольная призма (8 граней), ромбододекаэдр (12 граней), удлинённый ромбододекаэдр (12 граней), усечённый кубооктаэдр (14 граней). Последний является единственным примитивным параллелоэдром: в каждой его вершине сходится минимальное число – 4 параллелоэдра. Список всех 4-мерных (52 типа) параллелоэдров найден Б.Н. Делоне [4]. Из них только 3 примитивны и найдены Г.Ф. Вороным задолго до работы [4], а один пропущенный непримитивный позднее восполнен М.И. Штогриним.

При $d = 5$ ситуация принципиально усложняется, методы, работавшие для $d < 5$, становятся недостаточными. Метод разыскания параллелоэдров сводится к отысканию *параллелоэдров Вороного*. Рассмотрим точечную решетку и разбиение Вороного относительно точек. Т.к. любую точку решетки можно перенести в другую ее точку трансляцией, то группа трансляций решетки действует транзитивно на множестве областей Вороного в этом разбиении. Поэтому область Вороного для точки решетки является параллелоэдром и называется *параллелоэдром Вороного*. Не всякий параллелоэдр является параллеле-

лоэдром Вороного. На плоскости из параллелограммов таковыми являются лишь прямоугольники, а из центрально-симметричных 6-угольников – лишь описанные.

Г.Ф. Вороной [2] (1) разработал алгоритм нахождения для любой размерности d всех типов параллелоэдров Вороного; (2) доказал теорему – *всякий примитивный параллелоэдр может быть переведен подходящим аффинным преобразованием в некоторый параллелоэдр Вороного*. Таким образом, алгоритм (1) в силу теоремы (2) позволяет находить все типы примитивных параллелоэдров. О.К. Житомирский усилил теорему (2): *любой параллелоэдр, примитивный в $(d-2)$ -мерных гранях, аффинно эквивалентен некоторому параллелоэдру Вороного*. В каждой $(d-2)$ -грани параллелоэдра могут сходиться 3 или 4 соседа (см. ниже теорему Минковского). *Примитивный в $(d-2)$ -гранях параллелоэдр имеет в каждой $(d-2)$ -грани двух и только двух других соседей*. В силу теоремы Вороного-Житомирского алгоритм (1) позволяет отыскивать “почти все” параллелоэдры, за исключением тех, у которых в некоторых $(d-2)$ -гранях сходятся 4 параллелоэдра.

Характеристические свойства параллелоэдров

Теорема (Г. Минковский, 1997). *Если P (выпуклый) d -мерный параллелоэдр, заполняющий пространство нормальным (грань-в-грань) образом, то: (1) он центрально-симметричный; (2) любая гипергрань (размерности $d-1$) есть центрально-симметричный $(d-1)$ -многогранник; (3) проекция многогранника P вдоль $(d-2)$ -грани на плоскость есть параллелограмм или центрально-симметричный 6-угольник*. Упомянутая выше проблема об аффинной эквивалентности параллелоэдра некоторому параллелоэдру Вороного остается нерешенной лишь тогда, когда хотя бы одна проекция – параллелограмм.

Удивительно, что верна обратная теорема [7]. *Если выпуклый d -мерный многогранник P удовлетворяет условиям (1-3), то P – параллелоэдр, нормально заполняющий пространство*. Можно показать, что условие нормальности в теореме Минковского необязательно [18]. Из усиленной версии теоремы Минковского и теоремы Венкова следует: *если многогранник P заполняет пространство параллельными копиями, то он – параллелоэдр, т.е. многогранник, допускающий нормальное разбиение пространства параллельными копиями*. Отметим, что теорема Венкова является следствием гораздо более общей теоремы о продолжении (Н.П. Долбилин). Для числа граней (гиперграней) у параллелоэдра существует верхняя неулучшаемая оценка.

Теорема (Минковский, 1905). *Число гиперграней ($(d-1)$ -граней) у параллелоэдра не превышает $2(2^d - 1)$. Эта оценка неулучшаема, т.е. существуют параллелоэдры, у которых имеется ровно $2(2^d - 1)$ гиперграней*. В действительно-

сти, наименьшее число гиперграней $-2d$ – у параллелепипеда. Это – простейший параллеледр. Более того, для любого четного n между $2d$ и $2(2^d - 1)$ существует параллеледр с n гипергранями. Найдена оценка для сложности стереоэдра [8].

Теорема. Число гиперграней у стереоэдра не превышает $2(2^d - 1) + (h-1)2^d$, где h – число решеток стереоэдров в разбиении. Число решеток h связано с индексом $[G:H]$ подгруппы трансляций и никогда не превышает его. В свою очередь, индекс $[G:H]$ для данной размерности ограничен сверху некоторым $H(d)$, где $H(d) = d!2^d$ (порядок группы d -куба) для размерностей $d = 3, 5$ и всех $d > 10$. Поэтому из оценки Делоне-Сандаковой вытекает общая оценка для числа гиперграней d -мерного стереоэдра. Если $h = 1$, то последняя оценка совпадает с оценкой Минковского для числа гиперграней у параллелеоэдра. Но для больших h она, по-видимому, завышена. Так, для $d = 2$ оценка для числа сторон – 50 (!) вместо точной границы 6. Для $d = 3$ – 390, тогда как наиболее “сложный” из известных стереоэдров имеет 38 граней (П. Энгель). Оценка несколько улучшена А.С. Тарасовым: $2^d(H-1/2)-2$ вместо $2^d(H+1)-2$. Получена оценка для числа гиперграней тайлов в кристаллографическом разбиении, состоящем из m орбит: $2^d(mH+1)-2$ [14].

Локальный метод

Так как правильные и мультиправильные разбиения являются моделью кристаллической структуры, то естественно описать локальные геометрические условия организации структуры, ведущие к ее правильности, периодичности и т.п. Групповое определение правильного разбиения носит глобальный характер: согласно ему, каждый из тайлов идентично окружен до бесконечности другими тайлами. Но если раствор, в котором происходит кристаллизация, состоит из атомов одного наименования, то при кристаллизации каждый атом старается окружить себя другими атомами тем же образом лишь в конечных пределах. Таким образом, при кристаллизации получается структура, в которой каждый атом окружен соседями идентичным образом. Идентичность локального узора для каждого атома является причиной правильности кристаллической структуры в целом. Б.Н. Делоне и Р.В. Галиулин предложили сформулировать и доказать локальные условия правильности.

Пусть дано разбиение T , введем расстояние между тайлами P и P' . Соединим их цепочкой тайлов $P_1 = P, P_2, \dots, P_k = P'$, в которой каждые два соседние тайла P_{i-1} и P_i смежны по грани (в случае плоскости – по ребру). Длину k кратчайшей цепочки, соединяющей P и P' , назовем *расстоянием* $d(P, P')$. Для тайла P множество всех тайлов Q с $d(P, Q) \leq k$ назовем *короной* $C_k(P)$ *радиуса* k . Тайл P является *центром* короны. Вообще говоря, у короны помимо P может быть несколько других центров. Поэтому, когда говорим о короне C_k

(P), будем иметь в виду центр P . Обозначим через $S_k(P)$ группу тех симметрий короны $C_k(P)$, которые сохраняют тайл P . Подчеркнем, что $S_k(P)$ не $\text{Sym } C_k(P)$, а ее подгруппа – стабилизатор $\text{Stab}_P \text{Sym } C_k(P)$ тайла P в $\text{Sym } C_k(P)$. Ясно, что короны расширяются с ростом k : $C_{k-1}(P) \subset C_k(P)$, тогда как группы $S_k(P)$ могут только уменьшаться: $\text{Sym}(P) \supseteq S_1(P) \supseteq S_2(P) \supseteq \dots \supseteq S_{k-1}(P) \supseteq S_k(P)$. Корона $C_k(P)$ стабильна, если группы $S_{k-1}(P)$ и $S_k(P)$ совпадают: $S_{k-1}(P) = S_k(P)$. Короны $C_k(P)$ и $C_k(P')$ с центрами в P и P' конгруэнтны, если существует движение, переводящее первую корону во вторую и ячейку P в ячейку P' . Следующая теорема была одновременно доказана для разбиений и точечных множеств.

Локальная теорема (для правильных разбиений; для систем Делоне см. [11]). *Разбиение T тогда и только тогда является правильным, когда для некоторого k : (1) все короны $C_k(P)$ в T попарно конгруэнтны; (2) короны $C_k(P)$ стабильны.* Одного условия (1) недостаточно. С другой стороны, условие (2) выполняется в любом моноэдральном (попарно конгруэнтные ячейки) разбиении. Это связано с тем, что группа $\text{Sym } P$ ячейки конечна, а число падений не превосходит $\log_2 |\text{Sym } P|$. Поэтому на отрезке натуральных чисел $0 < k < \log_2 |\text{Sym } P|$ должно хотя бы раз наступить равенство $S_{k-1}(P) = S_k(P)$. Если при этом помимо (2) выполняется (1), то разбиение правильное.

Доказательство теоремы достаточно элегантно. Основное соображение состоит в том, что любое движение, переводящее корону радиуса $k-1$ вокруг тайла P в корону такого же радиуса вокруг тайла P' , переводит также корону радиуса k вокруг P в соответствующую корону вокруг P' . Отсюда следует, что любое движение, переводящее многогранник P и его k -ю корону в многогранник P' и его k -ю корону, переводит все разбиение в себя. Т.е. для каждой пары тайлов P и P' существует симметрия разбиения, переводящая P в P' , т.е. разбиение правильное. Из локальной теоремы можно вывести следующее: *если в разбиении 3-пространства все короны радиуса 5 попарно конгруэнтны, то разбиение правильно.* Доказано, что для плоскости конгруэнтность первых корон гарантирует правильность разбиения (Dolbilen, Schattschneider, 1998, Коломейкина 2004). В случае пространства конгруэнтность первых корон не достаточна для правильности (пример П. Ангеля). Предположительно, конгруэнтность корон радиуса 2 имплицирует правильность разбиения.

Переходя к кристаллографическим разбиениям, отметим, что количество N прототайлов, т.е. попарно различных шаблонов, копии которых участвуют в кристаллографическом разбиении, не обязательно равно 1. Обозначим через N_i число классов попарно конгруэнтных корон радиуса i . В случае правильного разбиения $N_i \equiv 1$. В случае произвольного разбиения это будет монотонно неубывающая последовательность: $N \leq N_1 \leq N_2 \leq \dots \leq N_i \leq N_{i-1} \dots$. Все коро-

ны радиуса i из одного j -го класса ($1 \leq j \leq N_i$) имеют одинаковые (сопряженные) группы симметрий S_j^i , порядки которых не возрастают с ростом радиуса i .

Локальный критерий кристаллографичности [13, 15]. Разбиение T является кристаллографическим (состоящим из m орбит тайлов) тогда и только тогда, когда при некотором целом положительном k выполнено: (1) $N_{k-1} = N_k$, т.е. число классов корон радиуса $k-1$ и k одно и то же; (2) $S^{k-1}_j = S^*_j$ для каждого $1 \leq j \leq N_k$, т.е. каждая корона радиуса k стабильна. До открытия квазикристаллических разбиений Пенроуза бесконечная повторяемость в данном разбиении любого из локальных узоров казалась не только необходимым, но и достаточным условием кристаллографического разбиения (Р. Фейнманн). Но это не так: в квазикристаллографическом разбиении Пенроуза каждый локальный узор встречается бесконечно много раз. Тем не менее, разбиение Пенроуза не является кристаллографическим. Приведенные в локальном критерии условия проводят рубеж между кристаллографическими и квазикристаллографическими разбиениями.

Теорема о продолжении

Локальная теорема для правильных разбиений, требующая конгруэнтности стабильных корон в данном разбиении, к сожалению, не содержит критерия того, что представляет из себя такая корона. Мы не в состоянии здесь точно описать содержание теоремы о продолжении [12, 16, 17]. Ее смысл состоит в том, что строится некоторый конечный комплекс, который естественно называть короной в ребрах, и формулируются необходимые и достаточные условия, при которых он однозначно продолжается до правильного разбиения всего пространства. Изначальный комплекс при этом оказывается короной некоторого радиуса k не в гранях, а в *ребрах*. Теорема о продолжении дает возможность посредством очень большого, но конечного перебора ответить на принципиальный вопрос теории: *дан выпуклый многогранник, допускает ли он правильное разбиение пространства?*

Чтобы “облегчить” задачу проверки, мы рассматриваем не *полные* короны, т.е. короны, определяемые смежностью в гранях произвольной размерности. Требуется, чтобы входящие в корону многогранники, имеющие общее ребро, не перекрывались. Но в условии теоремы допускается, что многогранники, входящие в корону, но имеющие общее ребро, могут перекрываться. Несмотря на это, доказываемся, что в получаемом разбиении многогранники попарно не перекрываются, значит, не перекрываются никакие многогранники и в исходном комплексе. Это ослабление требования в теореме о продолжении делает ее доказательство технически очень сложным. С другой стороны, благодаря требованию неперекрываемости лишь в ребрах, из теоремы о продол-

жении легко выводятся классические теоремы Венкова о параллелоэдрах и Кокстера о фундаментальных областях дискретных групп, порожденных отражениями.

Работа поддержана грантами РФФИ 05-01-00170 и НШ - 4182.2006.1.

Список литературы

1. Федоров Е.С. Начала учения о фигурах. С.-Пб., 1985; М., 1953.
2. Вороной Г.Ф. Исследование о примитивных параллелоэдрах // Собр. соч. Т. 2. Киев, 1952.
3. Bieberbach L. Über die Bewegungsgruppen der Euclidischen Raume I. Math. Ann. 1911, 70, 207-336; II. Math. Ann., 1912, 72, 400-412.
4. Delaunay B. Sur la partition reguliere de l'espace a 4 dimension // Изв. АН СССР. 1929, 16, 79-110; 2, 147-164.
5. Delaunay B. Sur la sphere vide // Изв. АН СССР. 1934, 6, 793-800.
6. Александров А.Д. О заполнении пространства многогранниками // Вестник ЛГУ, сер. матем., физ., хим. 1954, 9, 33-43.
7. Венков Б.А. О некотором классе эвклидовых многогранников // Вестник ЛГУ, сер. матем., физ., хим. 1954, 9, 11-31.
8. Делоне Б.Н., Сандакова Н.Н. Теория стереоэдров // Тр. МИАН. 1961, 64, 28-51.
9. Рышков С.С., Барановский Е.П. С-типы n-мерных решеток и пятимерные параллелоэдры (с приложением к теории покрытий) // Тр. МИАН. 1976, 137.
10. Berger R. The undecidability of the domino problem // Memoirs Amer. Math. Soc. 1966, 66, 1-72.
11. Делоне Б.Н., Долбилин Н.П., Штогрин М.И., Галиулин Р.В. Локальный критерий правильности системы точек // ДАН СССР. 1976, 227, 1, 319-322.
12. Долбилин Н.П. О локальных свойствах дискретных правильных систем точек // ДАН СССР. 1976, 230, 3, 516-519.
13. Долбилин Н.П., Штогрин М.И. Локальный критерий для кристаллической структуры // IX Всесоюзн. геометр. конф. Кишинев, 1987. С. 99.
14. Dolbilin N.P., Dress A.W.M., Huson D. Two finiteness theorems for periodic tilings of d-dimensional space // Discrete and Comput. Geometry. 1998, 20, 143-153.
15. Dolbilin N.P. Which clusters can form a crystal? // Voronoi's impact on modern science. V 2. Kyiv, 1998.
16. Dolbilin N.P. The extension theorem // Discrete math. 2000, 221, 1-3, 43-60.
17. Н.П.Долбилин, В.С.Макаров. Теорема о продолжении в теории правильных разбиений и ее приложения // Тр. МИАН. 2002, 239, 136-159.
18. Dolbilin N.P. On the Minkowski and the Venkov Theorems on Parallelotopes // Voronoi Conf. on Analytic Number Theory and Spatial Tesselations. Kyiv, 22-26 Sept., 2003.

ПРАВИЛЬНЫЕ РАЗБИЕНИЯ ПРОСТРАНСТВ ПОСТОЯННОЙ КРИВИЗНЫ И ИХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ГРУППЫ

В.С. Макаров¹, П.В. Макаров²

¹ Математический институт РАН, Москва

² Московский государственный горный университет, Москва

Цель данной статьи – дать краткий обзор проблем, связанных с правильными разбиениями пространств постоянной кривизны и дискретными (кристаллографическими) группами движений этих пространств. Основной акцент будет обращен на разбиения пространства Лобачевского.

Некоторые определения и факты. Большинство приводимых ниже определений может быть отнесено к любому метрическому пространству X^n постоянной кривизны, т.е. евклидовому E^n , сферическому S^n или пространству Лобачевского Λ^n . Условимся называть *телом* замыкание связной пространственной области. *Заполнением* пространства телами назовем произвольное расположение тел в пространстве. Если тела заполнения не имеют общих внутренних точек, то заполнение пространства называется *упаковкой*. *Покрытием* пространства телами назовем такое заполнение, при котором любая точка пространства принадлежит хотя бы одному телу заполнения. *Разбиением* пространства будем называть такое заполнение, которое является покрытием и упаковкой одновременно (т.е. каждая точка пространства принадлежит хотя бы одному телу разбиения и тела разбиения не имеют общих внутренних точек). Мы будем рассматривать в основном разбиения на выпуклые многогранники конечного объема (рис. 1).

Рассмотрим некоторое разбиение $\{P\}$ пространства многогранниками. Совокупность всех движений пространства, сохраняющих разбиение (т.е. переводящих его в себя) образует группу Γ , которую мы условимся называть *группой симметрии* разбиения $\{P\}$. Движения, являющиеся элементами этой группы, обычно называют *преобразованиями симметрии* данного разбиения (а соответствующие им инвариантные геометрические объекты – элементами симметрии). Разбиение называется *правильным*, если группа его симметрии действует *транзитивно* на совокупности тел разбиения, т.е. для любых двух тел P_1 и P_2 разбиения $\{P\}$ в группе Γ есть хоть одно движение γ , при котором первое из этих тел переходит во второе, $\gamma(P_1) = P_2$. Если при этом тела разбиения являются выпуклыми многогранниками, то их называют *стереоэдрами* (или *параллелеэдрами*, если Γ – группа параллельных переносов евклидова пространства). Если группа Γ действует на $\{P\}$ *однотранзитивно* (т.е.

движение γ - единственное), то многогранники разбиения называются *фундаментальными* многогранниками группы Γ .

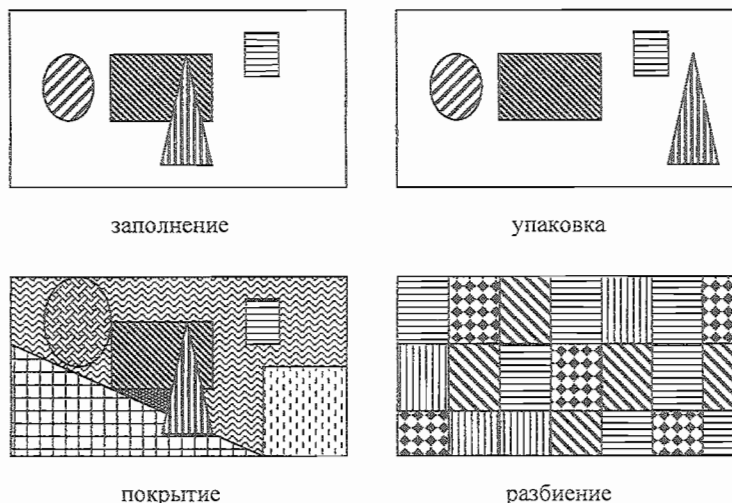


Рис. 1. К определению исходных понятий.

Группа Γ движений пространства X^n называется *кристаллографической*, если объем фундаментального многогранника конечен. Если какую-либо точку $A \in X^n$ повторить группой Γ , то полученное множество точек $\Gamma(A)$ называется *орбитой* или *траекторией* точки по группе, $\Gamma(A) = \{\gamma(A) \mid \gamma \in \Gamma\}$. Множество $D(A, \Gamma(A)) = \{M \mid M \in X^n, \rho(A, M) \leq \rho(A, \gamma(M)), \gamma \in \Gamma, \gamma \neq e\}$ называют *областью действия* или *областью Дирихле-Вороноя* точки A относительно траектории $\Gamma(A)$. Совокупность областей Дирихле-Вороноя данной системы точек называется *разбиением Дирихле*, соответствующим данной системе точек. Область Дирихле и разбиение Дирихле аналогично определяются для произвольной системы E точек пространства X^n , но для траектории $\Gamma(A)$ это разбиение $D(\Gamma(A))$ – правильное разбиение на выпуклые многогранники. Если, кроме того, точка A – *общего положения* относительно группы Γ (т.е. не переходит в себя ни при каком $\gamma \in \Gamma, \gamma \neq e$), то разбиение Дирихле является разбиением на фундаментальные многогранники группы Γ . Разбиение Дирихле всегда нормально. Напомним, что разбиение пространства на многогранники называется *нормальным*, если многогранники разбиения смежны лишь по целым граням, в противном случае разбиение называется *ненормальным*, типичный пример – кирпичная кладка (рис. 2).

Разбиения равными правильными многоугольниками евклидовой плоскости E^2 и сферы S^2 (платоновы тела) известны с глубокой древности. Во второй половине XIX в. были найдены все аналогичные разбиения (равными правильными многогранниками) пространств E^n , S^n и Λ^n , $n \geq 3$. Все произвольные правильные разбиения пространств постоянной кривизны найдены лишь для $n = 2$.

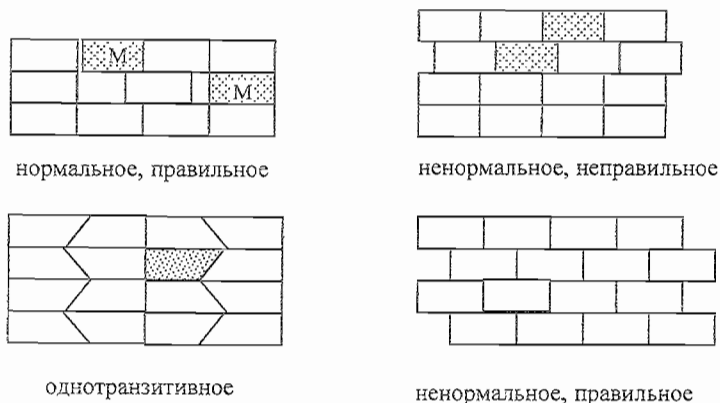


Рис. 2. Типы разбиений.

Вопрос о нахождении правильных разбиений самым тесным образом связан с вопросом о нахождении их групп симметрии (кристаллографических групп). Дадим определение такой группы, не опирающееся на понятие разбиения. Множество точек из X^n называется *дискретным*, если для каждой точки $M_0 \in E$ существует $r_0 > 0$, такое что в шаре радиуса r_0 с центром в M_0 нет точек системы E , отличных от M_0 (иногда требуют наличие радиуса r , общего для всех точек системы E ; его называют *радиусом дискретности* системы E , а систему E - *сильно дискретной* или *r -дискретной*). При этом очень часто слово “сильно” опускают и именно такую систему называют *дискретной*). Группу Γ движений пространства X^n условимся называть *дискретной*, если орбита любой точки пространства по группе Γ (сильно) дискретна. *Фундаментальной областью* дискретной группы Γ называется такая совокупность точек пространства, что никакие две ее точки не эквивалентны по Γ и, в тоже время, любая точка пространства эквивалентна одной из точек этой совокупности. При движениях из группы Γ фундаментальная область переходит в области, ей эквивалентные, а вся совокупность образов фундаментальной области образует правильное разбиение пространства, причем группа Γ действует однотранзитивно на этом разбиении. Основой всей (теоретической) кристаллографии служат особые дискретные группы движений, называемые федоровскими в честь Е.С. Федорова, нашедшего в 1890 г. все 230 таких групп в E^3 .

Определение. Группа Φ движений пространства Эвклида называется *федоровской*, если она обладает следующими двумя свойствами: (г) существует хотя бы одна точка A пространства, изолированная в классе эквивалентных ей точек, т.е. существует число $\gamma > 0$, такое, что в шаре $\Pi(A, \gamma)$ радиуса γ с центром в точке A нет точек из $\Phi(A)$, отличных от A (локальная дискретность: орбита $\Phi(A)$ — дискретна), (R) существует хотя бы одна такая точка B пространства, что класс эквивалентных ей точек расположен в пространстве R -однородно, т.е. существует такой (достаточно большой) радиус R (называемый *радиусом однородности* точки B), что внутри любого шара этого радиуса найдется эквивалентная B точка (локальная однородность) (рис. 3).

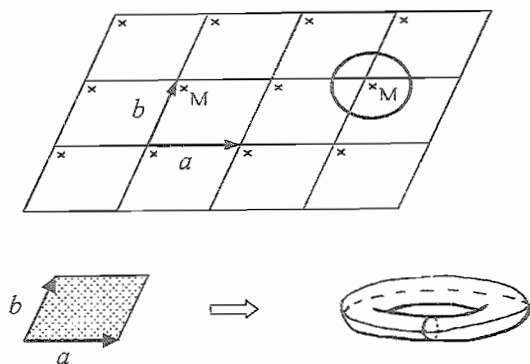


Рис. 3. Федоровская группа, фундаментальная область, фактор-пространство.

Далее доказывается, что из локальной однородности следует глобальная однородность: существование шара (достаточно большого) радиуса R' , такого что внутри любого шара этого радиуса найдется точка, эквивалентная по группе Φ любой наперед заданной точки пространства (при этом $R' \leq 2R$). Затем из глобальной однородности и локальной дискретности следует глобальная γ -дискретность: дискретность орбиты любой точки пространства. Далее следует доказательство возможности выбора фундаментальной области так, что ее замыкание есть выпуклый многогранник с конечным числом граней (фундаментальный многогранник группы Φ).

В пространстве Лобачевского такое определение исключает из рассмотрения весьма полезные дискретные группы с бесконечными (но конечными по объему) фундаментальными многогранниками. Поэтому в современной теории дискретных групп пространства Лобачевского (и в более общих случаях) составляют термин «кристаллографическая» для дискретной группы с конечным объемом фундаментальной области.

В случае E^n из определения федоровской группы следует довольно трудная основная теорема математической кристаллографии эвклидова пространства: всякая федоровская группа Φ имеет подгруппу T параллельных переносов той же размерности (теорема Шенфлис-Бибераха), из которой следует, что подгруппа T – нормальный делитель конечного индекса в группе Φ . Отсюда (и из алгебры движений точечных групп) получается конечность числа федоровских групп эвклидова пространства данной размерности, их полный вывод при помощи алгоритма Цессенхауза или по методу Е.С. Федорова путем использования возможных связей симметрии решеток и точечных групп.

Основная теорема теории стереоэдров в эвклидовом пространстве доказана Б.Н. Делоне и Н.Н. Сандаковой в 1961 г.: комбинаторно-топологических типов нормальных правильных разбиений эвклидова пространства данной размерности конечное число (после этого естественно встает вопрос о нахождении всех таких разбиений). В 1965 г. А.М. Заморзаев показал, что ненормальных правильных разбиений в эвклидовом пространстве данной размерности бесконечно много.

Все пять типов трехмерных параллелоэдров найдены Е.С. Федоровым в 1885 г. Четырехмерные параллелоэдры выведены в 1929 г. Б.Н. Делоне. В 1973 г. их список уточнен М.И. Штогриным в связи с поставленной перед ним задачей полного вывода всех стереоэдров для второй триклинной группы. Оказалось, что для нее существует всего 180 сортов Делоне (172 комбинаторных типа) разбиений Дирихле-Вороного на фундаментальные области. Среди них 15 общих и 165 специальных сортов разбиений (комбинаторных типов, соответственно, 14 и 158). М.И.Штогриным обнаружен интересный факт – возможность аперiodической системы действия для некоторых правильных разбиений Дирихле-Вороного. В 1972 г. С.С. Рышков показал, что при $n = 5$ имеется ровно 17 максимальных арифметических голоэдров. С.С. Рышковым и Е.П. Барановским (1976) изучены пятимерные примитивные параллелоэдры и С-типы n -мерных решеток. Ряд разбиений трехмерной сферы (четырёхмерных простых форм) найден Н.П. Долбилиным в 1971 г.

Отметим еще пару теорем, обычно остающихся в тени и “работающих” в любом X^n : *принцип симметрии элементов симметрии* (если F – геометрический элемент симметрии, соответствующий циклической группе $\{f\}$, а s – преобразование симметрии, то $s(F) = F'$ есть элемент симметрии, соответствующий сопряженной группе $s\{f\}s^{-1} = \{f'\}$, где $f' = s f s^{-1}$ – преобразование того же вида, что и f) и следующий из него *геометрический критерий нормального делителя* (для того, чтобы подгруппа H была нормальным делителем группы S , необходимо и достаточно, чтобы набор элементов симметрии F_H , характеризующий подгруппу H , был инвариантным относительно всех преобразований $s \in S$). В заключение отметим еще две фундаментальные теоремы общей

теории правильных разбиений: локальный критерий правильности и теорему о продолжении (о них речь пойдет в отдельном сообщении и потому касаться их не будем).

Элементы геометрии Лобачевского. Для обзора результатов, полученных в теории разбиений и теории кристаллографических групп пространства Лобачевского, придется коротко остановиться на некоторых фактах его геометрии. Отметим, что в этом году 12 (24) февраля исполнилось 150 лет со дня смерти Николая Ивановича Лобачевского и 180 лет со дня его первого доклада 11 (23) февраля 1826 г. об открытой им геометрии. Ее рождению предшествовала более чем двухтысячелетняя история попыток доказательства пятого постулата Эвклида: через точку A , не лежащую на прямой a , в плоскости, ими определяемой, проходит не более одной прямой b , не пересекающей прямой a . Прямые a и b , лежащие в одной плоскости и не пересекающиеся, Эвклид называл *параллельными*.

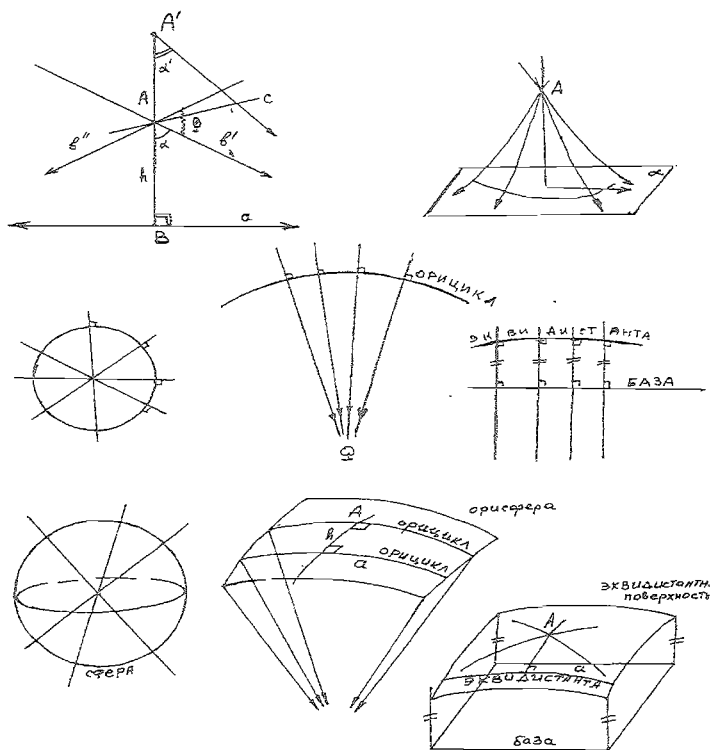


Рис. 4. Конструкции из геометрии Лобачевского.

Н.И. Лобачевский построил свою геометрию, взяв за основу все, что можно доказать без применения пятого постулата (эту часть геометрии Янош Бояи назвал абсолютной геометрией), и добавил к этому аксиому, отрицающую пятый постулат: существуют прямая a и точка A , ей не принадлежащая, такие, что в плоскости, ими определяемой, через точку A проходят две прямые b' и b'' , не пересекающие прямую a (рис. 4). Тогда очевидно, что и никакая прямая c , проходящая через точку A и идущая внутри угла β , не пересечет прямую a . Оказывается, все прямые пучка с центром в точке A делятся на три класса: 1) пересекающие прямую a (сходящиеся), 2) не пересекающие прямую a и имеющие с ней единственный общий перпендикуляр (расходящиеся), 3) две прямые b' и b'' , асимптотически приближающиеся к прямой a (в двух противоположных направлениях), которые, собственно, и называются *параллельными* (по Лобачевскому) к прямой a (в соответствующих направлениях). Угол α , образованный прямой b' с перпендикуляром AB (к прямой a), называют *углом параллелизма*. Этот угол $\alpha = \Pi(h)$ непрерывно уменьшается от $\pi/2$ до 0 при возрастании $h = |AB|$ от 0 до $+\infty$. Отсюда следует существование трех типов пучков на плоскости Лобачевского: эллиптического (с общим конечным центром A), параболического (с бесконечно удаленным центром Ω) и гиперболического (с общим перпендикуляром a (базой) у всех прямых пучков). Ортогональные траектории суть, соответственно, окружность, предельная окружность (орицикл) и эквидистанта (геометрическое место точек плоскости, равноудаленных от базы a и лежащих от них с одной стороны).

В пространстве Лобачевского вместо пары прямых b' и b'' , параллельных прямой a , возникает конус параллелизма: совокупность прямых, проходящих через точку A , не пересекающих эту плоскость и асимптотически к ней приближающихся. В качестве ортогональных траекторий соответственных связок прямых появятся: сфера (для эллиптической связки), орисфера (для параболической связки) и эквидистантная поверхность (для гиперболической связки). Соответственно, в пространстве Лобачевского имеются следующие типы движений: а) поворот v вокруг оси, б) предельный поворот w , в) скольжение t , г) винтовое движение, е) отражение m от плоскости и комбинации последнего с первыми четырьмя.

Если обратится к внутренней геометрии сферы, орисферы и эквидистантной поверхности (где роль "прямых" играют кратчайшие кривые этих поверхностей, а роль углов – углы между касательными к кратчайшим), то легко убедиться, что на сфере "работает" обычная сферическая геометрия, на эквидистантной поверхности внутренняя геометрия та же, что и на ее базовой плоскости (т.е. планиметрия Лобачевского), а вот на орисфере кратчайшие (их роль играют орициклы) ведут себя как прямые на плоскости Эвклида (внутренняя геометрия орисферы совпадает с планиметрией Эвклида). Отметим, наконец, что на плоскости Лобачевского сумма внутренних углов треуголь-

ника меньше 180° и зависит от его размеров (сравни: в геометрии двумерной сферы сумма углов больше 180° и возрастает с увеличением треугольника). Но на S^2 и Λ^2 размеры треугольника можно выбрать столь малыми, что отклонение суммы углов треугольника от 180° будет (по модулю) сколь угодно малым. К сожалению, нет возможности остановиться на различных интерпретациях геометрии Лобачевского.

Разбиение пространства Лобачевского. Приведенные выше сведения из геометрии Лобачевского уже позволяют нам получить некоторые примеры разбиений, например, получить все правильные разбиения плоскости Лобачевского на равные правильные многоугольники методом, подобным тому, который применяется для этих целей в сферической тригонометрии. В случае S^2 берется достаточно малый правильный треугольник, помещается в касательной плоскости к сфере так, чтобы его центр совпал с точкой касания, и проектируется на сферу лучами, идущими из центра O сферы. Так мы получим правильный сферический треугольник. Его плоский угол α_s меняется (возрастая с радиусом ρ вписанной окружности) от его евклидовой величины $\alpha_E = 60^\circ$ до предельной величины 180° (когда вершины треугольника окажутся на экваторе сферы). Таким образом, угол α_s (при соответствующих значениях радиуса ρ вписанной окружности) окажется равным (последовательно) углам $2\pi/5$, $2\pi/4$ и $2\pi/3$, что дает (соответственно) хорошо известные икосаэдрическое, октаэдрическое и тетраэдрическое разбиения сферы S^2 на равные сферические треугольники (рис. 5 а). Аналогично получают и два других правильных разбиения: кубическое и додекаэдрическое.

Если же поместить правильный треугольник не на сферу, а на плоскость Лобачевского, то его плоский угол α_L будет убывать (с возрастанием радиуса вписанной в треугольник окружности) от его евклидова значения $\pi/3$ до 0 и, следовательно, его величина пройдет через значения $2\pi/7$, $2\pi/8$, $2\pi/9$, $2\pi/10$ и т.д. Таким образом, плоскость Лобачевского разбивается правильным образом на равные правильные треугольники бесконечным числом способов. В этих разбиениях число треугольников, сходящихся в общей вершине, равно, соответственно, 7, 8, 9 ... (рис. 5 б). Аналогично решается вопрос для любого k -угольника. Относительно легко находятся все нормальные правильные разбиения пространства постоянной кривизны конечными равными правильными многогранниками. Все изогональные разбиения сферы S^n *неравными* правильными многогранниками были найдены в 1900 г. Т. Госсетом. Все возможные нормальные правильные разбиения при $n \geq 3$ не найдены ни для одного из пространств постоянной кривизны.

Как только геометрия Лобачевского начала получать свое признание, вопросы симметричного расположения тел в этом пространстве начали волновать воображение геометров. Еще сам Н.И. Лобачевский, пытаясь убедить совре-

менников в возможности применения его геометрии в микромире и макрокосмосе, отмечал, что в его геометрии шары (атомы, галактики ...) могут упаковываться совершенно не так, как в E^3 . Легко видеть, что одного шара в Λ^3 может касаться сколь угодно много равных ему шаров. Достаточно взять правильное нормальное разбиение плоскости Лобачевского Λ^2 на равные правильные k -угольники, вписать в многоугольники круги и на них (как диаметральных сечениях) построить шары того же радиуса, тогда одного шара будет касаться k равных ему шаров (возможны и другие интересные конструкции). Отметим, что в E^3 одного шара могут касаться не более двенадцати равных ему шаров и, следовательно, число касаний качественно характеризует метрику пространства. Успехи теоретической кристаллографии привлекли к этой проблематике и математиков. В частности, восемнадцатая проблема Гильберта состояла из двух "кристаллографических" вопросов: верен ли n -мерный аналог теоремы Шенфлиса (положительное решение получено Биберахом в 1911 г.) и всякое ли разбиение пространства равными многогранниками можно превратить в правильное за счет перестановки многогранников (отрицательное решение для E^n дано в 1928 г. К. Рейнгардтом).

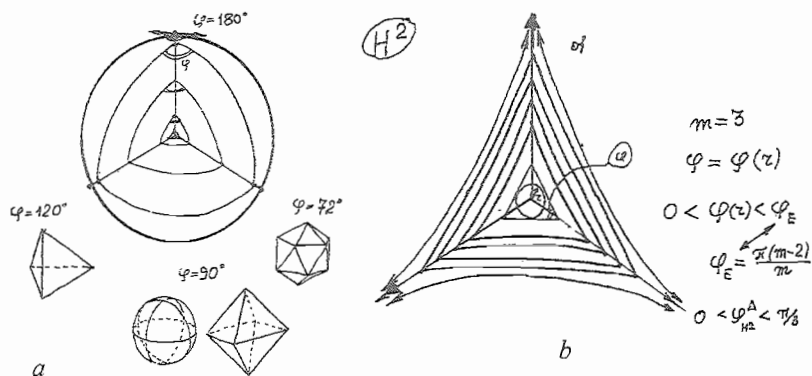


Рис. 5. Разбиения S^2 и Λ^2 на правильные треугольники

Как отметил Коксетер в докладе на ICM-1954, первые разбиения плоскости Лобачевского найдены Ф. Клейном в 1879 г. Практически полное решение проблемы классификации (по родам) таких разбиений было получено А. Пуанкаре в 1882 г. в мемуаре о фуксовых группах (где впервые приведена его знаменитая интерпретация плоскости Лобачевского на комплексной полуплоскости). А. Пуанкаре показал, что фундаментальную область дискретной группы Γ на Λ^2 всегда можно выбрать в виде выпуклого многоугольника, стороны которого попарно отождествляются теми движениями из группы Γ , которые переводят фундаментальный многоугольник в смежные с ним (по

стороне). Это привело А. Пуанкаре к классификации разбиений (и дискретных групп) в Λ^2 через (угаданную им) классификацию двумерных поверхностей по родам. Поверхность, соответствующая группе Γ , получается за счет склейки эквивалентных по группе сторон фундаментального многоугольника, т.е. за счет перехода к пространству орбит Λ^2 / Γ . Впоследствии это привело к естественному вопросу о классификации таких пространств (они называются формами Клиффорда-Клейна, если Γ — без кручения, т.е. не содержит элементов конечных порядков). Пуанкаре фактически дал классификацию двумерных ориентируемых многообразий. Кебе нашел число бр-б непрерывных параметров деформации такой поверхности рода p . Гурвицем получена оценка $84p-6$ порядка группы изометрий такой поверхности. В конце 20-х годов прошлого века до конца решена проблема бильярда (определения траектории точки) на одной из таких поверхностей — унимодулярной фигуре Клейна.

Другой областью математики, которая стимулировала интерес к проблемам дискретной геометрии пространства Лобачевского, была теория чисел, в частности, диофантовых уравнений и целочисленных унимодулярных автоморфизмов целочисленных квадратичных форм. Долгое время держалась гипотеза Бореля-Сельберга о том, что все дискретные группы в Λ^n — арифметические ($n \geq 3$). Первому из авторов этой статьи удалось в 1965 г. построить контрпример, основанный на построении счетной серии разбиений Λ^3 бесконечными многогранниками конечного объема, группы симметрии которых могут иметь повороты сколь угодно высокого порядка. Это стимулировало исследования Э.Б. Винберга, который нашел критерий арифметичности кристаллографических групп пространства Лобачевского. Используя эти результаты, Г.А. Моргулису удалось откорректировать гипотезу арифметичности и доказать ее справедливость в откорректированном виде. В 1990 г. М. Громовым и И.И. Шапиро-Пятецким доказано существование неарифметических групп в Λ^n (ими был использован метод склейки, разработанным В.С. Макаровым в 1965 г. и рассказанный им тогда же своему оппоненту по кандидатской диссертации И.И. Шапиро-Пятецкому).

Из наиболее интересных результатов в рассматриваемой области отметим теорему Мостова-Маргулиса о жесткости, теорему Маргулиса об ограниченности снизу некоторой константой, зависящей лишь от размерности пространства, объемов всей совокупности гиперболических многообразий данной размерности, результаты Терстона о тесной связи между геометрией и топологией маломерных гиперболических многообразий, теорему Никулина-Винберга об отсутствии коксетеровских групп в пространствах Лобачевского высоких размерностей, теорему Сельберга о наличии в кристаллографической группе Γ свободного от кручения нормального делителя N конечного индекса, теорему о наличии в этом нормальном делителе винтовых осей с иррациональными углами поворотов (И.С. Гуцул, В.С. Макаров).

Легко показывается бесконечность топологически различных нормальных правильных разбиений и неизоморфных федоровских групп пространства Лобачевского. Действительно, рассмотрим такое разбиение Λ^2 на k -угольники ($k \geq 7$), в вершинах которого k -угольники сходятся по 3. Восставим в центре каждого k -угольника перпендикуляр к плоскости α рассматриваемого разбиения и отложим (с обеих сторон от плоскости α) отрезки равной величины h . Проведем в концах полученных отрезков плоскости, им ортогональные (продолжая их лишь до взаимопересечения) и рассмотрим полученный бесконечный эквидистантный правильный многогранник (распадающийся на k -угольные правильные призмы) с равными правильными k -угольными гранями и правильными четырехгранными углами при вершинах (правильная $(k,3)$ -линза). Равные двугранные углы этого многогранника монотонно убывают с высотой h и нетрудно заметить, что при некотором определенном ее значении $h = h_0$ они станут равными $2\pi/4$. Соответствующая линза (а, следовательно, и k -угольная призма) будет разбивать Λ^3 , и мы получим счетную серию топологически различных нормальных правильных разбиений и неизоморфных федоровских групп в Λ^3 (рис. 6).

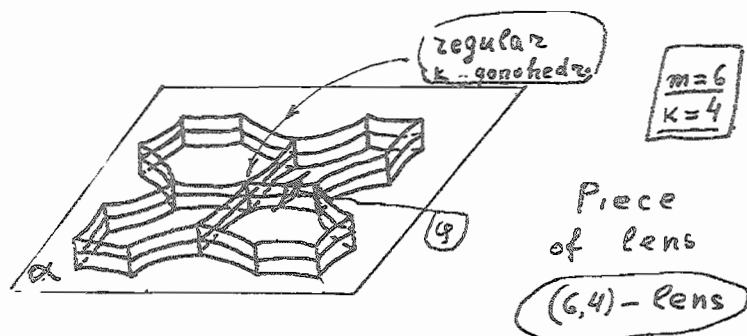


Рис. 6. (6,4) – линза.

Если бы мы попытались найти разбиение Λ^3 правильными симплексами (тетраэдрами), то заметили бы, что его двугранный угол φ варьирует в интервале от 0 до 70.5° , и потому конечный правильный тетраэдр не разбивает пространства Лобачевского (куб его разбивает, рис. 7). Но если вершины правильного тетраэдра становятся (при некотором значении $r = r_1$ радиуса вписанного шара) бесконечно удаленными, то его двугранный угол становится равным 60° и мы получаем разбиение Λ^3 такими предельными многогранниками. Если радиус r вписанного в тетраэдр шара увеличивать, то вершины тетраэдра становятся «идеальными», а у ребер, ранее инцидентных одной и

той же вершине, появится ортогональная всем им плоскость. За счет дальнейшего увеличения радиуса r можно добиться того, что двугранный угол тетраэдра окажется равным любому числу вида $2\pi/k$, $k \geq 7$, $k \in \mathbb{N}$. Если при этом "идеальные" вершины такого тетраэдра отсечь указанными выше плоскостями, то получится усеченный тетраэдр с углами $2\pi/k$ и $\pi/2$ (рис. 8, вверху), который дает коксетеро-вое разбиение Λ^3 .

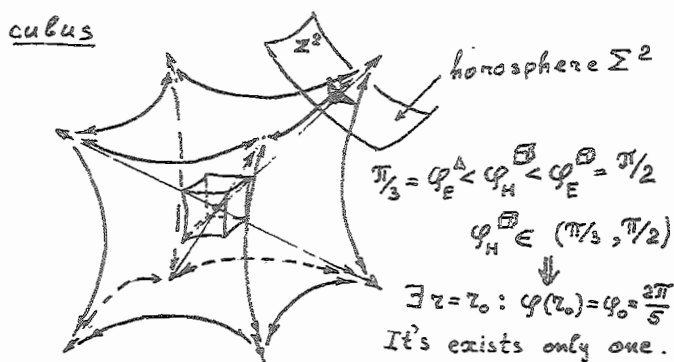
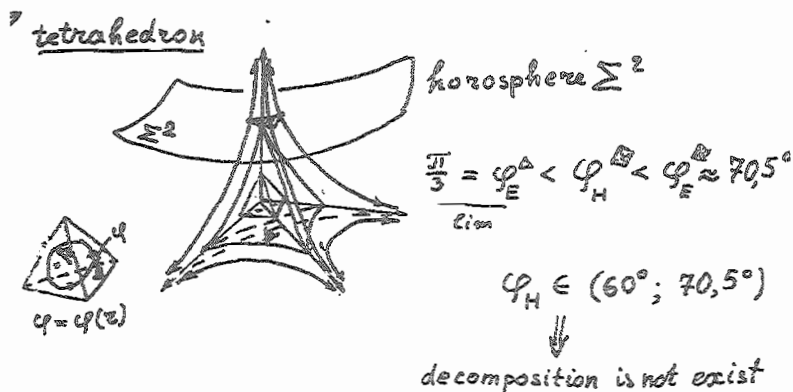


Рис. 7. Разбиения пространства Лобачевского.

Примененный при этом построении метод называют *методом усечения идеальных вершин* (граней). Аналогичную операцию можно проделать с многими, в частности, правильными многогранниками. Оказывается, иногда два таких усеченных многогранника (например, усеченные симплекс и куб) можно склеить вместе (по треугольной грани) и получить новый многогранник,

разбивающий Λ^3 (метод склейки), а если этого сделать нельзя, то часто удается найти некий буферный многогранник, к которому можно приклеить оба многогранника и затем соединить их в одном разбиении (метод буферного многогранника, рис. 8, внизу).

Эти методы позволили получить ряд новых свойств нормальных правильных разбиений и дискретных групп пространства Лобачевского. В частности, построены в размерностях 3, 4 и 5 локально Лобачевского формы Клиффорда-Клейна. Удалось построить разбиения, федоровские группы которых обладают любым наперед заданным набором двумерных подгрупп (в частности, центров симморфизма). Построены примеры ненормальных правильных разбиений в этих размерностях, получены (Макаров П.В., 1990 г.) аналоги кельвиновских разбиений и упаковок евклидова пространства (слоевые разбиения пространства Лобачевского). Не имея возможности дать полный список литературы, ограничимся указанием лишь некоторых работ и обзоров.

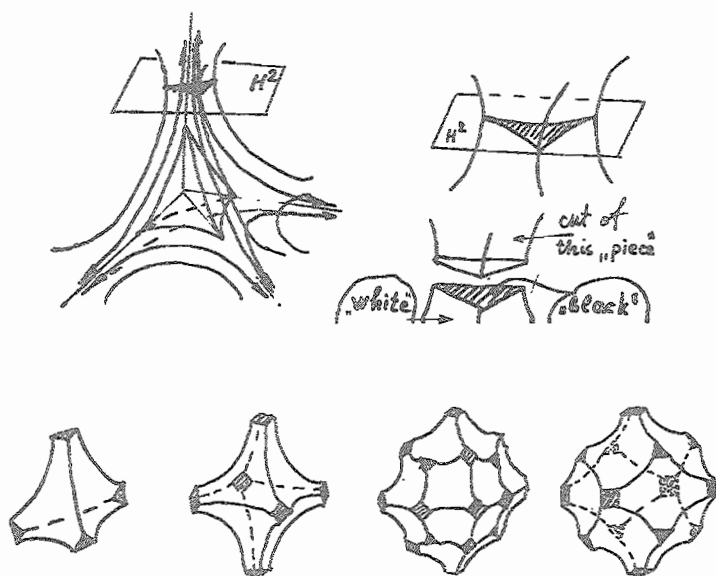


Рис. 8. Вверху: отсечение идеальной вершины. Внизу: Буферные многогранники.

Список литературы

1. Апанасов Б.Н. Геометрия дискретных групп и многообразий. М., 1991. 426 с.
2. Винберг Э.Б., Шварцман О.В. Дискретные группы движений пространств постоянной кривизны. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления. Т. 29. М.: ВИНТИ, 1988. С. 147-259.
3. Макаров В.С. Геометрические методы построения дискретных групп движений пространства Лобачевского. Проблемы геометрии. Т. 15. М.: ВИНТИ, 1983. С. 3-59.
4. Макаров В.С. Проблемы дискретной геометрии пространства Лобачевского // In memoriam N.I. Lobatschevskii. V 3, Pt 2. Казань, 1995. С. 47-56.
5. Маргулис Г.А. Арифметические свойства дискретных подгрупп // УМН. 1974. Т. 24. Вып. 1. С. 49-98.
6. Федоров Е.С. Начала учения о фигурах. Л., 1953. 409 с.
7. Фейеш Т. Расположения на плоскости, сфере и в пространстве. М., 1958. 363 с.
8. Coxeter H.S.M. Regular honeycombs in hyperbolic space. Groningen-Amsterdam, 1954. P 155-169.
9. Poincare H. Memoire sur les groupes fuchsiennes // Acta math. 1882, 1, 1-62.

ТОПОЛОГИЯ ДРОБЛЕНИЯ В СВЕТЕ ПРИНЦИПА КЮРИ¹

Н.А. Заренков. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Введение

Вид ранних стадий дробления, включая бластулу, не может не вызывать в сознании ясные геометрические образы вроде кристаллов и полиэдров. Геометрическая образность ранних стадий дробления могла бы объяснить причины интереса исследователей к методам топологии (Мещеряков, Белоусов, 1978; Преснов, Исаева, 1985; Morris et al., 1989; Гуреева, 1991). Эта образность утрачивается в процессе последующего развития. Во всяком случае, пространственная организация, “огранка” бластулы представляется чем-то иным, нежели строение дефинитивных организмов. Наряду с бластулой топологической проблемой остаются и отдельные клетки, которые представляются полиэдрами. В связи с этим нелишне отметить, что сходство бластомеров с пузырями мыльной пены (Robert, 1902) распространяется на клетки паренхимных тканей растений (Kohn, 1980); но для дефинитивных организмов требуются иные модели и ассоциации. Возможности топологии для изучения клеток и тканей показаны, например, в серии работ К. Льюиса, обсуждаемых В.В. Смоляниновым (1980) и В.М. Маресиным (1990). Полиэдрами остаются колонии жгутиковых *Pandorina* (Войтеховский, 2001) и сфероид вольвокса, традиционно занимающий видное место в гипотезах о происхождении многоклеточных. Границами этого растительного полиэдра служат клетки, образующие двумерную ткань. Исследования вольвокса, выполненные В.В. Смоляниновым и В.М. Маресиным (1972), имеют двойное значение: во-первых, они посвящены топологии двумерной ткани, во-вторых – модели гипотетического многоклеточного организма или его зародыша. В последнем случае вольвокс отвечает бластуле.

Зародыш подобен дефинитивному организму в том отношении, что состоит из более мелких структурных единиц: бластомерам зародыша, клеткам отвечают органы дефинитивного организма. Но если взаиморасположение органов можно увязать с их функциями, то размещение бластомеров остается проблемой иного рода. В самом деле, какое функциональное значение для зародыша могла бы иметь радиальность или спиральность размещения бластомеров, наделенных лишь проспективным значением, или закономерности размещения бластомеров, различающихся количеством сторон (ребер). Сомнения в функциональности пространственной организации бластулы тем более уместны, что в отличие от дефинитивного организма, активно осуществляющего обмен веществ, стадии дробления, включая бластулу, не растут.

¹ Опубликовано с изменениями в журнале “Онтогенез”. 2006. Т. 37. № 4. С. 243-260.

Установлено, что в результате палитомических делений наблюдается измельчание отдельных бластомеров и уменьшение общей массы бластулы (Белоусов, 1980). Вследствие физиологической инертности зародыш довольствуется малой относительной поверхностью, которая свойственна вообще любым телам сферической формы. В связи с этим обстоятельством контраст с высокосложным дефинитивным организмом разителен.

Гипотеза о значении принципа Кюри для изучения топологии бластулы

В свете принципа Кюри, общенаучного по своему статусу и получившему признание у эмбриологов (Белоусов, 1987), физиологическая инертность могла бы объяснить своеобразие пространственной организации бластулы. Поясняющим примером служат кристаллы. Практически они не осуществляют обмен веществ, и их собственные элементы симметрии задаются межатомными силами. В таком случае неясно осознаваемое сходство симметрий ранних стадий эмбриогенеза с кристаллами, действительно, не представляется случайным: основание для сходства – это слабый обмен веществ у зародыша или практически полное его отсутствие у кристаллов.

Что же касается дефинитивных организмов, то согласно принципу Кюри их собственные элементы симметрии сохраняются постольку, поскольку совпадают с элементами симметрии среды, например, поля тяготения. Это обстоятельство обусловлено активным обменом веществ, совокупностью основных физиологических функций организма. Понимаемый достаточно широко обмен веществ – это перемещение среды (дыхание, питание, выделение), а также внутреннее движение (кровооток) и рост – медленное движение неподвижно прикрепленного организма. Жизненно важное значение для организма имеет вообще любое движение, активное и пассивное (Зенкевич, 1944). Действительно, попробуем представить себе неподвижный организм в неподвижной среде – он вскоре погибнет, если не от удушья, то от голода или отравления продуктами собственной жизнедеятельности.

Следуя за А.С. Сониным (1987), в трактовке принципа Кюри можно обратиться к симметрии актинии. Она подвержена силе земного тяготения, которая является вектором. Векторы обозначаются пучком стрелок, образующих конус. Стрелки начинаются на поверхности планеты, занятой актинией (основание конуса), остаются в плоскостях, проходящих через центр планеты, и сходятся в ее центре. Свойственные среде обитания элементы симметрии – вектор, ось конуса и проходящие через нее плоскости, накладываются на актинию и только они сохраняются у нее в виде векторизованной оси и некоторого количества радиальных плоскостей симметрии, например, по числу щупалец пищедобывающего аппарата. Можно видеть, что это обстоятельство

обусловлено трофической функцией и общим обменом веществ, т.е. совокупностью основных физиологических функций организма.

Методы проверки гипотезы

Материалом для публикации послужили изображения бластул и более ранних стадий дробления с ясно различимыми границами между бластомерами (Иванова-Казас, 1978, 1995; Гуреева, 1979). Количество изображений невелико, меньше, чем представляется на первый взгляд. Границы между бластомерами спрямлялись таким образом, что из каждого получался многоугольник и бластула преобразовывалась в полиэдрический эквивалент.

Изучение топологии бластулы встречается с трудностью, которая неизбежно сопутствует переносу информации с поверхности трехмерного тела на плоскость. Приводимые в литературе изображения одной и той же бластулы с анимального и вегетативного полюсов, справа и слева, полностью не отменяют этой трудности. Она сохраняется и при анимации (вращении) плоского изображения бластулы на экране монитора. В определенной мере эти трудности позволяет обойти проекция Шлегеля, на которую внимание биологов обратил Ю.Л. Войтеховский (2001). В настоящей публикации, ограниченной главным образом методическими вопросами, вместе с проекцией Шлегеля рассмотрены и другие топологические модели.

Как представляется автору, отдаленной целью подобного рода исследований остается описание пространственной организации зародышей на языке топологии, а дробления – как последовательности топологических преобразований. На этой основе стала бы возможной систематизация разнообразия стадий дробления, а также построение системы топологически возможного разнообразия стадий дробления – как в комбинаторной теории полиэдров и кристаллографии (Егоров-Тисменко, Литвинская, 2000). В таком случае реально наблюдаемое разнообразие оставалось бы частью более обширного разнообразия. В целом обсуждаемый вопрос сводится к прикладной задаче теории полиэдров о всевозможных покрытиях сферы многоугольниками. В настоящее время она не имеет общего решения. Проекция Шлегеля, возможно, упрощает эту задачу. Для описания полиэдра и проекции Шлегеля использованы гранные символы. Они означают число разных граней полиэдра и многоугольников проекции Шлегеля. Так же как к полиэдрам, к фигуре проекции Шлегеля приложимы Эйлеровы характеристики. Вместе с гранными символами они сохраняют основную информацию о топологии бластулы: число разных бластомеров, преобразованных в грани полиэдра, число ребер и вершин полиэдров.

Значение полиэдра не ограничивается ролью посредника между бластулой и проекцией Шлегеля. Дополнительно он облегчает выявление симметрий бластулы, которые лишь угадываются на ее обычных изображениях. В результате то, что в сравнительной эмбриологии принято называть спиральной, радиальной и двусторонней симметрией, оказывается группами симметрий, принятыми в кристаллографии. Значит, преобразование симметрий в эмбриогенезе и филогенезе – это преобразования групп симметрий. Кроме того, на проекции Шлегеля ясно видна комбинаторика многоугольников, образующих поверхность полиэдра и бластулы. Благодаря этому открывается возможность для компьютерного изучения сплоченности бластомеров.

Далее, обсуждается соответствие поверхности бластулы и более ранних стадий эмбриогенеза кругам Эйлера (Шашкин, 1984) и диаграммам Венна, используемым в логике. Согласно А.С. Кузичеву (1968) при общем внешнем сходстве они содержательно неодинаковы математически; но для нас эти различия не имеют значения. В настоящей публикации круги Эйлера и диаграммы Венна служат для решения трех задач. Во-первых, они использованы по назначению – для наглядного представления логически упорядоченной информации о проспективном значении бластомеров. Во-вторых, они служат в качестве проекции трехмерного зародыша на плоскость, но иной, чем проекция Шлегеля. Этот смысл вкладывается в выражение “проекция Эйлера” и “проекция Венна” реальных бластул. В этом случае диаграммы использованы не по назначению. В-третьих, диаграммы послужили для воссоздания полиэдров, которые могли бы служить моделью гипотетических бластул. В определенной мере третья задача (от проекции – к трехмерному телу) обратна второй (от трехмерного тела – к проекции).

Смежностью клетки принято называть число клеток, примыкающих к данной (Маресин, 1982). В нашем случае клетками являются бластомеры и поэтому целесообразно пользоваться выражением “смежность бластомера”. Целесообразность уточнения вызвана особенностями поверхности бластулы и полиэдра. Их поверхности не имеют краев (“краевой фактор”), поэтому среди бластомеров и граней нет краевых. Между тем у обычной плоской фигуры имеются края и краевые клетки, и смежность краевых клеток меньше, чем у некраевых. Для бластомеров и отвечающих им граней полиэдров “краевой фактор” не имеет значения: смежность любого бластомера (грани полиэдра) равна числу его ребер и вершин. Сходным образом “краевой фактор” не влияет на степень вершины бластомера, которая представляет собой число исходящих из нее ребер. У одного бластомера степени вершин могут быть не равны, как и смежности разных бластомеров одной бластулы.

В данной публикации следующие выражения сохраняют преемственность: “бластомеры” (бластулы), “грани” (полиэдра), “многоугольники” (проекция

Шлегеля) и “ячейки” (проекция Эйлера и Венна). Этим объясняется, почему выражение “гранный символ” использовано для описания проекций Шлегеля, подразделенных на многоугольники, проекций, образованных ячейками, и бластул, сложенных бластомерами. Преемственность терминов отражает последовательность преобразований: бластулы – в полиэдр, полиэдра – в плоскостные проекции Шлегеля, Эйлера и Венна и обратно.

Радиальное дробление

В результате второго деления ($n = 2$) зигота подразделяется на 2^2 бластомеров. Если они размещаются радиально, как на рис. 1 а (например, у иглокожих), то их проекцией на плоскость может служить фигура из двух кругов Эйлера (рис. 1 б). В таком случае бластомеры отвечают четырем двугольным граням, которые возможны только на неевклидовой поверхности. Один из них образован наружными дугами окружностей, ограничивающих два внешних угла, и охватывает окружающую плоскость. Величина смежности бластомеров равна двум, степень вершин равна четырем. В общей сложности у бластулы имеются четыре ребра и две вершины на анимальном и вегетативном полюсах. Значит, гранным символом бластулы будет 2_4 (двугольников – четыре), а характеристика Эйлера $V - P + G$ (где V – вершины, P – ребра, G – грани) составит $2 - 4 + 4 = 2$.

Центральная ячейка кругов Эйлера (рис. 1 б) образована пересечением двух кругов и поэтому имеет символ 11. Окружающая плоскость обозначена символом 00. В прочих ячейках единица указывает на один конкретный круг. Стадия 2^2 бластомеров имеет единственную ось симметрии L_4 . Сферу, покрытую двугольниками, невозможно преобразовать в обычную проекцию Шлегеля, и для нее не существует полиэдрического эквивалента. На последующих стадиях развития бластомеры у иглокожих нередко образуют тор, топологически иное тело, нежели сфера (Гуреева, 1991). Но вследствие замыкания полярных отверстий может происходить “осферивание” зародыша (Иванова-Казас, 1995). Ниже имеется в виду именно этот случай.

Для зародыша на стадии 2^3 бластомеров (рис. 1 в) проекция Эйлера дана на рис. 1 г. Ячейки обозначены по примеру рис. 1 б. Эти обозначения пригодны для бластулы и октаэдра. На проекции Эйлера ясно видны 7 треугольников, ограниченных дугами окружностей, тогда как 8-й ограничен внешними дугами (периметр фигуры проекции) и охватывает окружающую плоскость. Полиэдрическим эквивалентом зародыша служит октаэдр (рис. 1 д). Гранный символ октаэдра – 3_8 (треугольников – восемь). Октаэдр имеет 6 вершин, 12 ребер и 8 граней (по числу бластомеров). Эйлерова характеристика октаэдрического зародыша выглядит так $6 - 12 + 8 = 2$.

У октаэдра имеется общая с гексаэдром (кубом) группа симметрий. Она включает 13 осей вращения (3 четверных, 4 тройных, 6 двойных), 9 плоскостей и центр C : $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$. Чтобы построить проекцию Шлегеля (рис. 1 е), в качестве базовой возьмем одну из треугольных граней октаэдра. На ее ребрах внутри отложим смежные треугольные грани. Нетрудно убедиться, что все составляющие характеристики Эйлера для октаэдра (число вершин, ребер и граней) сохраняются и у проекции Шлегеля. При подсчете граней следует учесть, что базовый треугольник отвечает внешнему, восьмому треугольнику проекции Эйлера. При этом внешние углы проекции Эйлера преобразованы во внутренние углы базового треугольника проекции Шлегеля. У октаэдра и обеих проекций каждая грань (ячейка) соседствует с тремя другими как blastomeres у зародыша. Таким образом, смежность каждого blastomera равна 3, а степень любой вершины составляет 4.

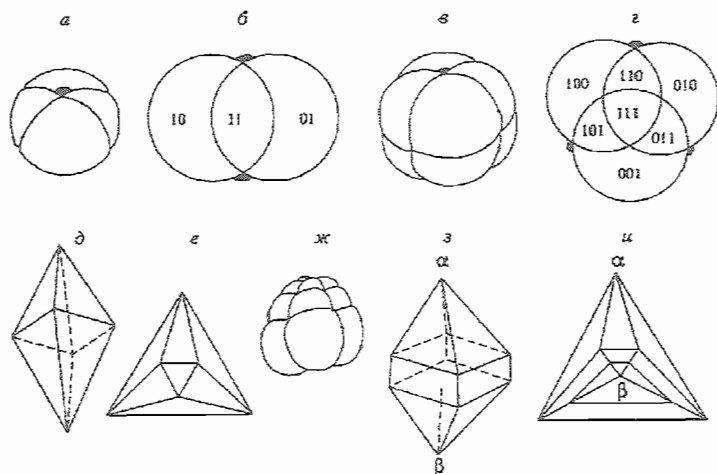


Рис. 1. Радиальное дробление иглокожих: а – стадия 22 бластомеров, анимальный полюс; б – проекция Эйлера для той же стадии, выделены два внешних угла, один из них примыкает к анимальному полюсу; в – стадия 23 бластомеров, анимальный полюс; г – проекция Эйлера для той же стадии, выделены три внешних угла, один примыкает к анимальному полюсу; д, е – октаэдр, полиэдрический эквивалент (д) и проекция Шлегеля (е) для стадии 23 бластомеров; ж – стадия 12 бластомеров; з-и – полиэдрический эквивалент (з) и проекция Шлегеля (и) для стадии 12 бластомеров.

Для стадии 12 бластомеров (рис. 1 ж-и) гранным символом будет $3_8 4_4$, а характеристика Эйлера составит: $10 - 20 + 12 = 2$. Степень вершины каждого blastomera равна 4, а смежность blastomeres составляет 3 или 4. Для стадии 12 бластомеров не существует проекций Эйлера и Венна, потому что они состоят из 2^n ячеек (n – число фигур проекции, совпадает с номером деления

зиготы) с учетом наружной ячейки (рис. 1 б, г). Кроме того, по построению степень вершин проекций равна 4, а не 3-4. Этими обстоятельствами объясняется невозможность применения проекций Эйлера и Венна к стадиям с числом бластомеров, отличным от 2^n , но проекция Шлегеля неизменно сохраняет свое значение для любой стадии. Квартеты треугольных граней октаэдра, окружающих вершины α и β , ясно различимы и на проекции Шлегеля. Они разобраны поясом четырехугольных граней (рис. 1 з, и).

Спиральное дробление

Размещение бластомеров как на рис. 1, сохраняется только в случае радиального дробления. В процессе спирального дробления оно вообще не наблюдается или преходяще. Различие между двумя рассмотренными типами дробления наглядно выявляется при сравнении рис. 1 а и рис. 2 а: через общую вершину 4 бластомеров (радиальное дробление) проходит смежное ребро двух бластомеров (спиральное дробление). Оно называется спайкой. При спиральном дроблении все ребра – спайки, поэтому степень вершин равна 3. Поскольку на проекциях Венна и Эйлера получаются вершины только с 4 исходящими ребрами, они непригодны для отображения спирального дробления. За редкими исключениями, смежность бластомеров реальных бластул ≥ 4 . На неевклидовой поверхности бластулы смежность бластомера равна числу его ребер.

У моллюска *Trochus* на стадии 2^2 бластомеры размещаются так, что каждый имеет три вершины (рис. 2 а-в). Поэтому поверхность зародыша разделена на 4 сферических треугольника и ее эквивалентом служит тетраэдр. Гранный символ тетраэдра – 3_4 (треугольников – четыре). Тетраэдр имеет 4 вершины, 6 ребер и 4 грани по числу бластомеров. Его Эйлерова характеристика $4 - 6 + 4 = 2$. Степень вершины каждого бластомера и смежность равны 3 (последнее – редкое исключение при спиральном дроблении). Поэтому для тетраэдрической стадии не существует проекции Эйлера.

Чтобы построить проекцию Шлегеля, следует учесть, что каждому бластомеру отвечает треугольник. На одной стороне базового треугольника изнутри строим второй треугольник. К нему на свободных сторонах базового треугольника изнутри пристраиваем еще два треугольника. В результате треугольные грани соприкасаются как у тетраэдра, и проекция сохраняет те же составляющие характеристики Эйлера. Если же рассматривать проекцию как обычный треугольник, составленный из трех более мелких, то Эйлерова характеристика сократится на единицу. Наконец, на проекции Шлегеля сохраняется смежность бластомера и степень вершины 3.

На стадии 2^2 бластомеров насчитывается 3 пары антиподальных спаек и через каждую пару проходит гомополярная ось симметрии L_2 , если не учитывать различные размеры бластомеров. Одна из трех осей L_2 , называемая анимально-вегетативной, имеет особое перспективное значение. Но на тетраэдре полярные спайки неотличимы от прочих, на проекции Шлегеля ими могла бы служить любая пара взаимно ортогональных спаек (рис. 2 б-в). Различия между спайками можно обозначить размерами бластомеров, но для топологии они не имеют значения. Группа симметрии тетраэдра $3L_2 (3L_4) 4L_3 6P$ включает 4 оси L_3 , 3 инверсионных оси L_4 и 6 плоскостей P .

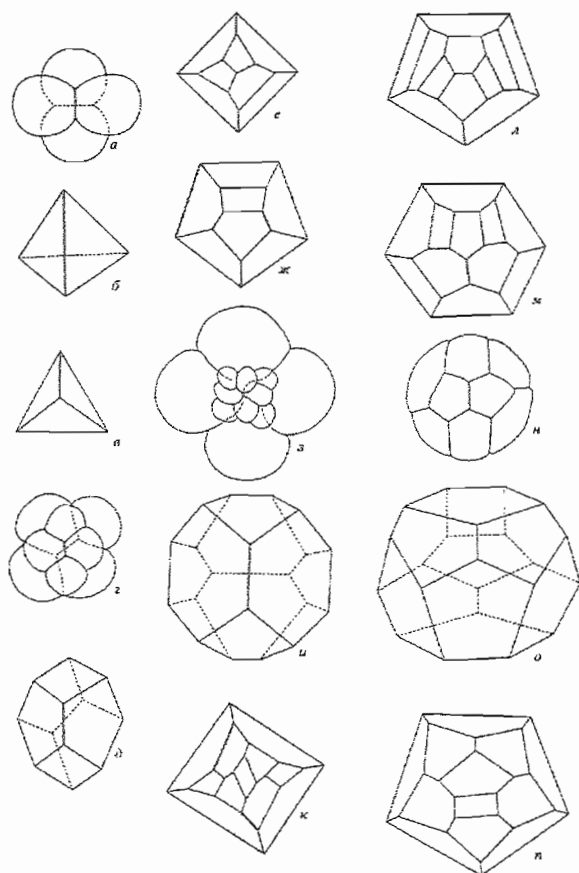


Рис. 2. Спиральное дробление: а - стадия 2^2 бластомеров моллюсков *Trochus*; б - тетраэдр, эквивалент той же стадии; в - проекция Шлегеля для той же стадии; г - стадия 2^3 бластомеров *Trochus*; д - полиэдрический эквивалент той же стадии; е, ж - проекции Шлегеля для той же стадии на основе 4- и 5-угольной граней; з - стадия 12 бластомеров моллюсков *Crepidula*; и - полиэдрический эквивалент той же стадии; к-м - проекции Шлегеля для той же стадии на основе 4- (к), 5- (л) и 6-угольной (м) грани; н - стадия 13 бластомеров рачка *Holopodium* с анимального (слева) и вегетативного (справа) полюсов; о - полиэдрический эквивалент той же стадии; п - проекция Шлегеля для той же стадии на основе 5-угольной грани.

На последующей стадии 2^3 поверхность полиэдрического эквивалента зародыша образована 4- и 5-угольниками (рис. 2 г-ж), смежность равна 4 или 5, гранный символ 4_45_4 , характеристика Эйлера $12 - 18 + 8 = 2$. Проекция Шлегеля может быть построена из 4- и 5-угольников. На

каждой проекции есть три пары антиподальных спаек, через одну из них проходит анимально-вегетативная ось симметрии L_2 . Всего насчитывается три оси L_2 , как и на стадии 2^2 бластомеров. Они гомополярны, потому что одинаково окружение спаек на полюсах: с боков к ним примыкают 5-угольники, а к концам спаек — вершины двух 4-угольников. Все оси и спайки сохраняются на проекциях Шлегеля независимо от того, какая грань служит базовой, 4- или 5-угольная (рис. 2 *е-ж*). По литературным данным, указанные элементы симметрии сохраняются у 8-клеточного зародыша других трохофорных животных и погонофоры (Иванова-Казас, 1977; рис. 16, 41, 55, 63, 172).

На последующей стадии 12 бластомеров моллюска *Crepidula* (рис. 2 *з-к*) гранным символом служит $4_5 5_4 6_4$, характеристика Эйлера $20 - 30 + 12 = 2$. При этом полярные спайки сохраняются в виде смежного ребра двух 6-угольных граней, а к обоим концам ребра примыкают 5-угольники. В окружение каждой полярной спайки входят пара 5-угольников и пара 6-угольников, что отлично от стадии 2^3 бластомеров. Единственная пара таких полярных спаек сохраняется на всех трех проекциях Шлегеля независимо от выбора базовой грани. Через эти спайки проходит анимально-вегетативная ось L_2 бластулы — единственная гомополярная вследствие одинакового состава бластомеров на полюсах. Прочие спайки окружены бластомерами с иным количеством ребер. По (Mottis *et al.*, 1989), все перечисленные свойства сохраняются у 12-клеточного зародыша полихеты *Nereis*.

Рост числа бластомеров до 13 (рис. 2 *л-о*) вызывает изменение гранного символа и характеристики Эйлера: $4_5 5_{10} 6_2$ и $22 - 33 + 13 = 2$. Т.е. возрастание числа бластомеров от 12 до 13 вызвало рост числа вершин от 20 до 22 и ребер от 30 до 33. Еще большие изменения претерпел гранный символ. Этот пример позволяет оценить непростое соответствие между ростом числа бластомеров и изменениями характеристик Эйлера и гранных символов. Представляет интерес сопоставление проекций Шлегеля для разных стадий радиального (рис. 1) и спирального дробления (рис. 2). Фигуры проекций остаются двусторонне-симметричными, хотя реальные бластулы наделены радиальной симметрией. Значит, преобразование трехмерной бластулы в плоскую фигуру сопровождается преобразованием симметрии.

Поэтому следует считаться с особыми изобразительными возможностями проекций Шлегеля, как бы параллельными таковым трехмерных тел. Исключение составляют стадии 2^2 и 2^3 бластомеров радиального дробления (рис. 1 *а, в*). Их плоские проекции сохраняют радиальную симметрию реальной бластулы, хотя порядок симметрии сокращается. У обеих стадий он равен 4, у проекции на стадии 2^2 уменьшился до 2, на стадии 2^3 — до 3 (рис. 1 *б-г*). В обоих исключительных случаях плоскими эквивалентами служат проекции Эйлера, непригодные для более поздних стадий развития.

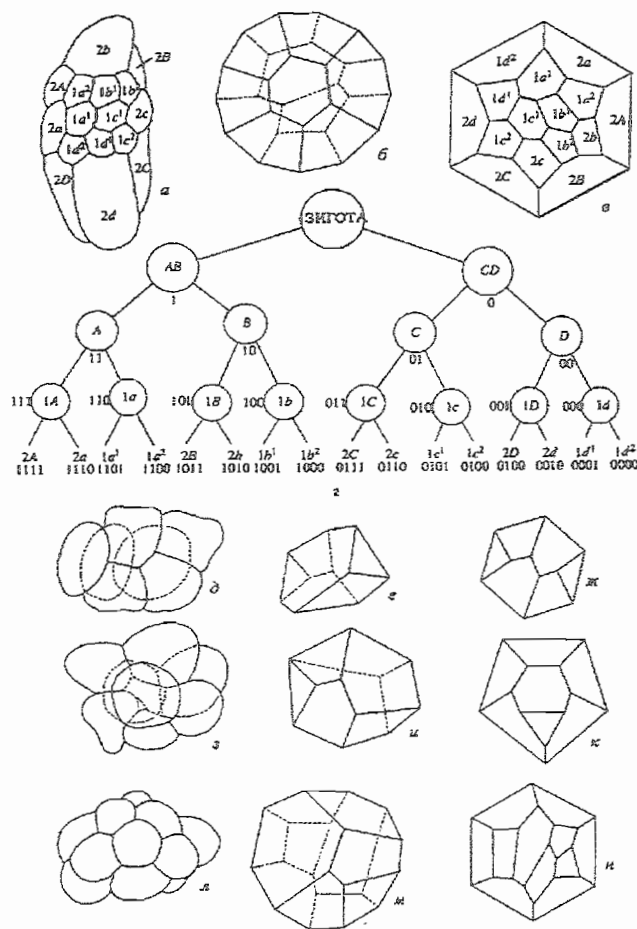


Рис. 3. Спиральное и билатеральное дробление: а — бластула погонофоры *Nereis* на стадии 2⁴ бластомеров спирального дробления, вид с анимального полюса (Гуреева, 1979); б — проекция Шлегеля для той же стадии на бластомер 2D, в — полиэдральный эквивалент той же стадии (выделена анимальная спайка, к ней примыкают бластомеры 1a¹ и 1c¹ розетки, а также вегетативная спайка между бластомерами 2B и 2D); г — генеалогическое древо 2⁴ бластомеров моллюска *Trochus* (традиционные названия дублируются упорядоченными цифровыми обозначениями, составленными из нулей и единиц); д — зародыш аскариды *Parascaris* на стадии 7 бластомеров билатерального дробления; е — полиэдрический эквивалент для той же стадии; ж — проекция Шлегеля для той же стадии; з — бластула аскариды *Parascaris* на стадии 12 бластомеров; и — полиэдрический эквивалент для той же стадии; к — проекция Шлегеля для той же стадии; л — бластула аскариды *Parascaris* на стадии 12 бластомеров; м — полиэдрический эквивалент для той же стадии; н — проекция Шлегеля для той же стадии.

Стадия 2⁴ бластомеров (рис. 3 а-в) рассмотрена на примере погонофоры: гранный символ $5_{12}6_4$, характеристика Эйлера $27 - 41 + 16 = 2$, группа симметрий $3L_{14}4L_36P$. На рис. 3 б, в изображены соответствующий полиэдр и его проекция Шлегеля с ясно различимой розеткой на анимальном полюсе. Она образована двумя 6-угольными (1a¹ и 1c¹) и двумя 5-угольными бластомерами

(1b¹ и 1d¹), причем полярная спайка находится между бластомерами первой пары. К вегетативной спайке прилежат 6-угольные бластомеры 2В и 2D (последний служит базовым 6-угольником), к ее концам примыкают 5-угольные бластомеры 2А и 2С. Спайки пересекаются почти под прямым углом. Если считаться с перекрестом спаек и взаиморасположением бластомеров разных полюсов, симметрию бластулы следует признать инверсионной, а ось симметрии гетерополярной.

Билатеральное дробление и классы эквивалентности полиэдрических эквивалентов бластулы

Билатеральное дробление рассмотрено на примере трех стадий дробления аскариды (рис. 3 д-н, табл. 1). Их полиэдральные эквиваленты явно диссимметричны, но проекция Шлегеля остается симметричной на первой стадии. Несмотря на особенности гранного символа $3_1 4_3 5_3 6_1$, у стадии 2³ бластомеров аскариды сохранились одинаковые со стадией 2³ моллюска *Trochu* составляющие характеристик Эйлера (табл. 2). Другой пример подобного рода – стадия 12 бластомеров аскариды и моллюска *Crepidula*: при неодинаковых проекциях Шлегеля и гранных символах они имеют одинаковые характеристики Эйлера (табл. 2) как у додекаэдра: $20 - 30 + 12 = 2$. По этому признаку вместе с додекаэдром они двойственны икосаэдру: $12 - 30 + 20 = 2$ (рис. 4 а, б). Уместно подчеркнуть, что обсуждаемые двойственные полиэдры различаются группами симметрий.

Другую пару двойственных правильных полиэдров составляют куб и октаэдр, наделенные одной и той же группой симметрии (рис. 4 в, г). По этому признаку они входят в класс эквивалентности двойственных полиэдров, несмотря на то, что различаются гранными символами и характеристиками Эйлера. Примером октаэдра служит стадия 2² бластомеров иглокожих (рис. 1 д). Что касается гексаэдра, то он, возможно, не воплощен в известных ныне реальных сферических зародышах животных. На рис. 4 д видно, как мог бы выглядеть гипотетический кубический зародыш, состоящий из шести бластомеров. Он представляется проекцией гексаэдра на поверхность сферы изнутри сферы. Кроме того, рис. 4 д служит примером, поясняющим, как вообще может осуществляться проективное соответствие между полиэдрами и сферическими бластулами. Диаграмма Венна для $n = 5$ дана в (Кузичев, 1968; Кондаков, 1971), для $n = 6$ – в (Заренков, 2001).

Кубическая стадия могла бы возникнуть в результате множественного митоза (шизогонии) при взаимно ортогональном положении осей трех митотических веретен в центре зиготы. Другим способом достижения результата могло бы служить несинхронное деление: после стадии 2² бластомеров третье деление должно было бы осуществиться только у двух бластомеров. В результате об-

шее количество бластомеров составило бы шесть, что часто наблюдается у нематод. Но их бластомеры обычно не образуют сферического тела, отвечающего кубу. Сходным образом в результате шизогонии могла бы возникнуть 4-клеточная стадия (рис. 4 е), неотличимая от реальной тетраэдрической стадии как результата двух последовательных делений зиготы (рис. 2 а). Вместе с тетраэдром и другими платоновыми телами (рис. 4 а, з) о возможности полиэдрического воплощения результатов шизогонии свидетельствуют изоэдры, среди которых обычна изомерия (рис. 4 к-н). По неизвестным причинам в эмбриогенезе животных нет шизогонии.

Таблица 1. Топологические параметры реальных бластул и их моделей.

Число делений	Реальная бластула		Проекция Венна и Эйлера для n фигур		“Простая модель” (сечения сферы)	
	гранный символ	характеристика Эйлера	гранный символ	характеристика Эйлера	гранный символ	характеристика Эйлера
3	3_8	$6-12+8=2$	3_8	$6-12+8=2$	3_8	$6-12+8=2$
4	$5_{12}6_4$	$27-41+16=2$	$3_8 4_8$	$14-28+16=2$	$3_8 4_6$	$12-24+14=2$
5	$4_4 5_{12} 6_{12} 7_4$	$58-87+32=2$	$3_{16} 4_8 5_8$	$30-60+32=2$	$3_{10} 4_{10} 5_2$	$20-40+22=2$
6	нет данных		$3_{24} 4_{24} 5_6 6_3$	$62-124+64=2$	$3_{16} 4_{10} 5_6$	$32-62+32=2$

Таблица 2. Топологические параметры полиэдров и реальных бластул.

Полиэдры, бластулы	Характеристика Эйлера			Гранный символ
	вершины	ребра	грани	
Гексаэдр	8	12	6	4_6
Октаэдр	6	12	8	3_8
Додекаэдр	20	30	12	5_{12}
Икосаэдр	12	30	20	3_{20}
<i>Trochus</i> , 8 бластомеров	12	18	8	$4_4 5_4$
<i>Parascaris</i> , 8 бластомеров	12	18	8	$3_{16} 4_8 5_3$
<i>Crepidula</i> , 12 бластомеров	20	30	12	$4_4 5_4 6_4$
<i>Parascaris</i> , 12 бластомеров	20	30	12	$4_3 5_4 6_5$

Двойственность и одинаковые симметрии (икосаэдр и додекаэдр, октаэдр и куб) выделяют первые два класса эквивалентности полиэдров, которые могут иметь место в классификации бластул. Существует и другие классы эквивалентности, основанные, например, на равноставленности. Плоские равноставленные фигуры в общем виде обсуждаются Болтянским (1956), приложением проблемы служит игра танграм (Гарднер, 1994). Равноставленными изомерами могут считаться право- и левозакрученные бластулы брюхоногих моллюсков одной стадии n – они имеют общий гранный символ. Их принято считать зеркальными изомерами, как плоские правая и левая ладони, хотя в действительности объектом суждения остаются трехмерные тела.

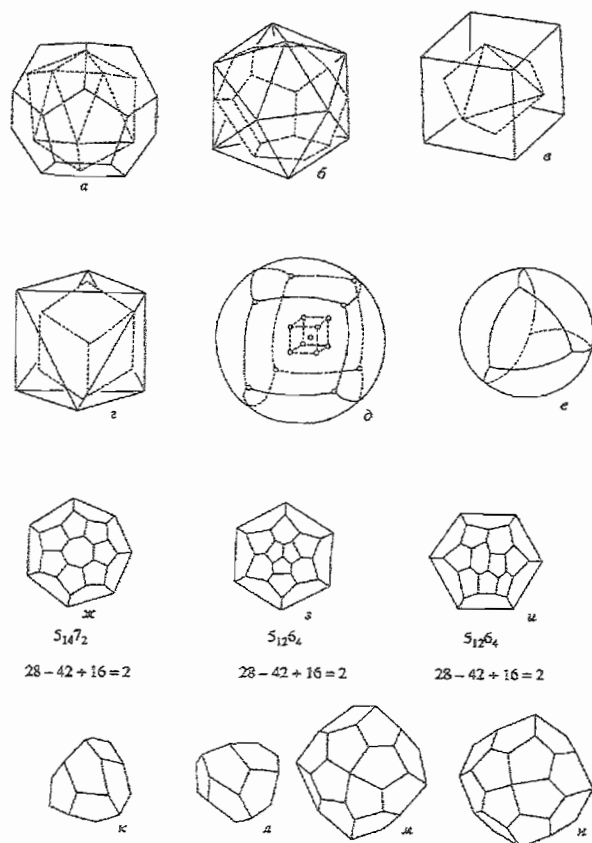


Рис. 4. Двойственные полиэдры и полиэдрические эквиваленты бластул и равноставленные изомеры: а – икосаэдр в додекаэдре; б – додекаэдр в икосаэдре; а – октаэдр в кубе; г – куб в октаэдре; д – 4-клеточная гипотетическая стадия дробления; е – 3-клеточная гипотетическая стадия дробления; ж-и – три равноставленных изомера колониальной водоросли *Pandorina*, 2^4 клеток, даны гранные символы и характеристики Эйлера (по: Войтеховский, 2001); к-л – пара изомеров с гранным символом 5_{12} ; м-н – пара изомеров с гранным символом 5_{19} .

В общем виде задача о равноставленных изомерах бластулы состоит в следующем: существуют ли изомеры бластулы, которые имеют один и тот же гранный символ и, различаясь размещением одних и тех же blastomeres, могли бы иметь разные группы симметрий. В частности, они могут быть парой спиральных изомеров как брюхоногие моллюски, но в об-

шем случае равносоставленные изомеры могли бы не иметь спиральности. Поскольку существует соответствие трехмерных бластул полиэдрам и, далее, их плоским проекциям, задача может быть заменена более простой – о равносоставленных изомерах плоских проекций Шлегеля.

Попытка решить задачу “вручную” на примере проекции Шлегеля для бластулы стадии 2^3 бластомеров (рис. 2 е, ж) дала отрицательный результат: 2^3 многоугольных граней, имеющих степень вершины 3, можно уложить в базовом многоугольнике единственным способом и, значит, равносоставленных изомеров бластулы на стадии 2^3 бластомеров не существует. Этот результат, полученный для весьма скромного по объему фактического материала, мог бы свидетельствовать о возможности жесткого топологического контроля за организацией бластулы на стадии 2^3 бластомеров.

Но существуют примеры равносоставленности, не сопряженной с зеркальной изомерией. Это некоторые колонии водоросли *Pandorina*, изученные Ю.Л. Войтеховским (2001). При одинаковых гранных символах они имеют разные группы симметрий. Например, существует пара 16-клеточных (рис. 4 з-и) равносоставленных изомеров, неразличимых по характеристике Эйлера. Тем не менее, их симметрии неодинаковы. Третий изомер отличается от первых двух иными гранным символом и симметрией (рис. 4 ж). Нет оснований отрицать возможность подобной изомерии и у зародышей животных.

Таким образом, трудность классификации стадий дробления может проистекать из неоднозначной связи между разными топологическими параметрами. Но складывается впечатление, что группы симметрий могут служить наиболее полным выражением прочих параметров и основанием для выделения классов эквивалентности. В таком случае классификация разнообразия пространственной организации стадий дробления может быть основана прежде всего на группах симметрий, претерпевающих изменения в процессе эмбриогенеза. Выделяемые при этом типы развития симметрий пространственной организации могут не совпадать с таксонами традиционной систематики. В сравнительной эмбриологии (Иванова-Казас, 1995) соответствие между разными типами дробления обычно рассматривается в связи с филогенией. Но если типы развития симметрий не совпадут с таксонами, целесообразность филогенетического истолкования таких соответствий может оказаться сомнительной.

Значение бластокинеза для топологии типов дробления

Положение спаек, характерных для спирального дробления, объясняется разными причинами (Siewing, 1969; Маресин, 1990). Поскольку различия между механизмами закладки спаек в данном случае не имеют значения, ради крат-

кости все они (чередование митозов, смещение бластомеров, регуляция плоскости деления у смежных клеток и др.) далее обозначены как “бластокинез”.

У *полихет* спиральное размещение бластомеров трактуется как результат “поворота” квадрантов бластулы вокруг анимально-вегетативной оси бластулы (рис. 5 а-е). В свою очередь, на сферической поверхности поворот сводится к двум сдвигам во взаимно ортогональных направлениях плоскости проекции (Morris *et al.*, 1989). Результаты бластокинеза – смежности бластомеров, спайки и степени вершин 3 (как у кирпичей в обычной кладке), проявляются на всей поверхности бластулы (рис. 5 ж, з). Ее топологическое преобразование как единого целого возможно благодаря связности бластомеров, не меняющих соседей в ходе эмбриогенеза (Маресин, 1990).

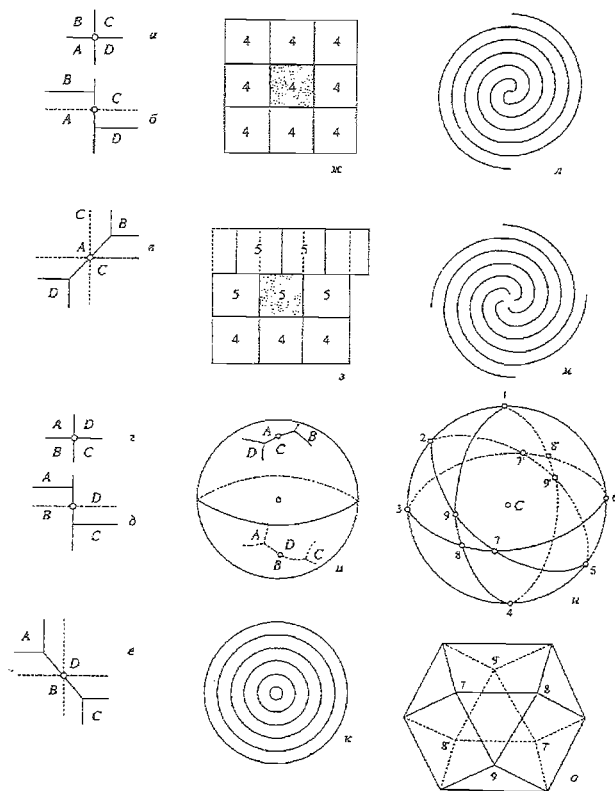


Рис. 5. Топологические преобразования на сферической поверхности бластулы: а-е – закладка розетки и спайки на анимальном полюсе и их преобразование сдвигами; з-е – то же на вегетативном полюсе (Morris *et al.*, 1989); ж-з – сдвиг, в результате которого смежность бластомера (в середине) возрастает от 4 до 5, степень вершин сокращается от 4 до 3; и – дефинитивное положение инверсионно-симметричных спаек на антиподальных полушариях бластулы; к-м – переход радиального размещения бластомеров в спиральное двумя сдвигами вокруг анимально-вегетативной оси бластулы; н – “простая модель” бластулы: сферическая поверхность, подразделенная на $(2^4 -$

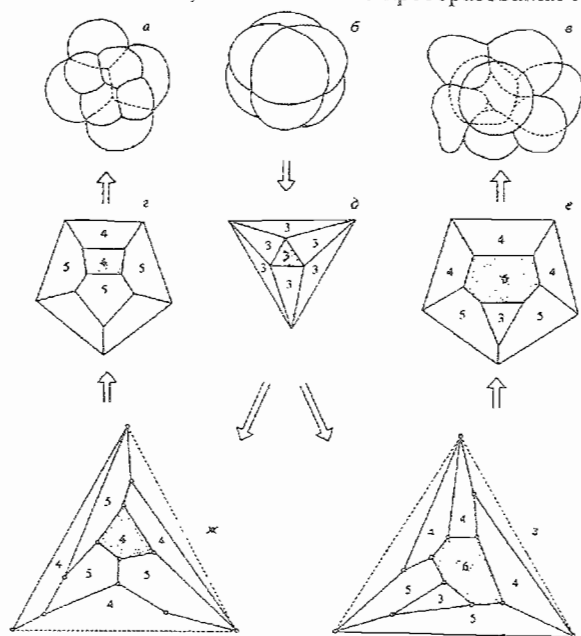
2) ячеек четырьмя большими кругами (один из них проходит через вершины 1-6); о – полиэдрический эквивалент “простой модели”, инверсионно-симметричными гранями служат треугольники 7-9 и 7'-9'.

Обратимся к радиально-симметричной бластуле иглокожих (рис. 1 а, в, ж). На плоской проекции бластомеры размещены радиально на concentрических окружностях вокруг общего центра, с которым совпадает полюс бластулы (рис. 5 к). Для преобразования радиальности в спиральность надо выполнить два сдвига во взаимно ортогональных направлениях, что соответствует повороту квадрантов. В результате получатся спиралевидные кривые, исходящие из общего центра на одном полюсе бластулы (рис. 5 л, м). На одном радиусе вновь построенной фигуры окажутся бластомеры, ранее находившиеся на разных радиусах, в каждом секторе на соседних дугах будет неодинаковое число бластомеров — на внутренних меньше, чем на наружных. Поэтому возникнут спайки и размещение бластомеров будет напоминать кирпичную кладку. Секторы фигуры составлены из дуг окружностей и, поскольку дуги окружности имеют иную кривизну, нежели спираль, у преобразованной бластулы, строго говоря, не возникло бы спиральности. При наблюдении с анимального или вегетативного полюса плоская проекция полушария бластулы представляется 4-лучевой радиальной (рис. 5 м). Это преобразование поясняет топологическое соответствие между двумя типами дробления.

Спираль анимального полушария продолжается на вегетативном и, следовательно, сохраняет свой знак, например, по часовой стрелке. При этом полуспирали полушарий одной бластулы различаются направлением: одна исходит от полюса, другая приближается к нему. Т.е. они остаются изомерами по вектору спирали. В таком случае бластулы право- и левозакрученных брюхоногих моллюсков, оставаясь зеркальными изомерами по знаку спирали, могли бы считаться равноставленными изомерами по вектору полуспиралей соответствующих полушарий. Что касается 8 октантов одной бластулы, то они могут быть совмещены отражением в центре инверсии, поэтому каждая бластула имеет инверсионную симметрию. Она адекватнее характеризует симметрию бластулы как трехмерного тела, чем симметрия плоских изображений. Обсуждаемая изомерия может быть описана в терминах антисимметрии по А.В. Шубникову (1951). Непрерывная сферическая поверхность преобразуется как единое целое и на антиподальных полюсах квадранты сдвигаются в противоположных направлениях. Поэтому анимальная и вегетативная спайки становятся инверсионными изомерами (рис. 5 и). Они совмещаются по инверсионной оси L_2 . При этом учтен только перекрест спаек и не приняты во внимание буквенные обозначения бластомеров, свидетельствующие об их генеалогии, и степени вершин бластомеров.

Итак, бластокинез как причина появления спаек, изменения степени бластомеров и их вершин может трактоваться как топологическое преобразование сферы. Исходя из этой посылки, рассмотрим преобразование стадии 2^3 бластомеров иглокожих (радиальное дробление) в соответствующую стадию спирального дробления моллюсков и аскариды (билатеральное дробление)

(рис. 6 а-з). “Целью” сдвигов является преобразование граничных символов и характеристик Эйлера. Возьмем проекцию Шлегеля для бластулы иглокожих (рис. 1 е, рис. 6 а, з) и сдвигом осуществим на ней бластокинез. Полученная проекция (рис. 6, д) могла бы отвечать таковой для бластулы моллюсков (рис. 2 ж, рис. 6 е) и реальной бластулы (рис. 6 в). Аналогично выполняется преобразование для билатерального дробления аскариды (рис. 6 а, б, з-з). Таким образом, имеет место соответствие трех основных типов дробления. Обратим внимание на то, что описанные преобразования на плоских фигурах не могут



считаться непрерывными, но сохраняют непрерывность на поверхности бластулы вследствие ее неразрывности в ходе бластокинеза.

Рис. 6. Преобразование стадии радиального дробления (б) в стадию билатерального (в) и спирального (а) дробления сдвигом ячеек проекции Шлегеля (д) для радиального дробления (б); цифры — смежность ячеек, пунктир — ячейка, смежность которой возрастает от 3 (д) до 4 (з) и 6 (е).

“Простая модель” бластулы

Поверхность зародыша остается однородной, пока образована одинаковыми гранями. Это наблюдается, например, на тетраэдрической стадии 2^2 бластомеров и на стадии 2^3 бластомеров (рис. 1 а, в; рис. 2 а, б). Здесь же могут быть упомянуты прочие правильные полиэдры (рис. 4 а-е), а также изоэдры (рис. 4 к-н). Они служат примерами трехмерных тел с однородной поверхностью. Их можно считать прообразами неизвестных науке стадий с однородной поверхностью. С возрастанием числа бластомеров появляются неравные грани и поверхность бластулы становится неоднородной, изменяются смежности и степени вершин. Они определяются в результате бластокинеза (в широком смысле) на неевклидовой поверхности, влияя на симметрию бластулы и ее

принадлежность к классу эквивалентности. Для воссоздания этого процесса следует считаться с двумя обстоятельствами: 1) неоднородность нарастает с ростом числа бластомеров, 2) неоднородность наблюдается на неевклидовой поверхности. Оба обстоятельства наглядно проявляются на ранних стадиях радиального дробления (рис. 1 а, в). Они поясняют геометрически простой и потому кажущийся естественным способ дробления. Возникает соблазн распространить его на более поздние стадии, что и составляет суть описываемой ниже “простой модели”.

“Простая модель” – это представление зародыша в качестве сферы, пересеченной плоскостями, проходящими через ее центр. На пересечении плоскостей с поверхностью сферы образуются большие круги. На них располагаются пары антиподальных точек. Круги попарно пересекаются в антиподальных точках: через пару точек одного круга может пройти еще один большой круг. Это условие выполняется на рис. 1 а, в и не выполняется на рис. 1 ж и др. Точки пересечения больших кругов – это вершины, дуги больших кругов – ребра. Они ограничивают грани. По построению, из каждой вершины могут исходить только 4 ребра. Это обстоятельство ограничивает непосредственное (без бластокинеза) применение “простой модели”, потому что у реальных бластул степень вершины обычно меньше 4. Грани “простой модели” (рис. 5 н, о), отвечающие бластомерам – это выпуклые многоугольники, возникающие на поверхности сферы как пересечения полусфер (Долбилин, 2000). Большие круги занимают меридиональное и экваториальное положение. У реальной бластулы в случае радиального дробления они сменяются парамеридиональными обычно при пятом делении бластомеров, в случае спирального дробления парамеридиональным является уже второе деление. При этом, естественно, больших кругов не возникает.

“Простая модель” осуществлена на стадиях 2^2 и 2^3 бластомеров радиального дробления (рис. 1 а-в). Число больших кругов равно числу делений n и совпадает с числом кругов Эйлера (рис. 1 б-г). Каждая точка пересечения больших кругов служит общей вершиной 4 бластомеров, в которой сходятся 4 ребра. Таким образом, степень вершины равна 4. На рис. 5 н, о изображена “простая модель” для условной стадии $n = 4$. Она представляет собой сферу, пересеченную большими кругами. Ячейки “простой модели” симметричны относительно центра инверсии, но у реальной бластулы он почти всегда отсутствует и существовал бы при шизогонии.

“Простая модель”, образованная пересекающимися полусферами, напоминает о диаграммах Эйлера и Венна, которые, однако, состоят из пересекающихся плоских фигур. Отсюда, казалось бы, следует возможность означения ячеек “простой модели” для $n \geq 4$ двоичным кодом по примеру диаграмм (рис. 1, б, г; рис. 3, в). В действительности же, по названной ниже причине это невоз-

можно. Параметры “простой модели” для $n = 5$ и 6 даны в табл. 1. Первая насчитывает 22 ячейки, вторая 32, т.е. меньше имеющихся у реальных бластул 2^n бластомеров (32 и 64). Получается, что на “простой модели” с 5 и 6 и даже 4 большими кругами поверхность бластулы остается тесной, на ней не могут разместиться все 2^4 , 2^5 , 2^6 бластомеров. От этого недостатка свободна другая модель деления поверхности бластулы, которую можно назвать “логической”

Логическая модель бластулы

Используемые в логике диаграммы Эйлера и Венна (Кондаков, 1971) состоят из 2^n ячеек, считая внешнюю. Таким образом, число ячеек совпадает с числом бластомеров 2^n реальных стадий (табл. 1). Будучи перенесены на сферическую поверхность, ячейки диаграмм становятся гранями полиэдра (рис. 5 а, б). Он именуется “логической моделью” бластулы на стадии 2^n бластомеров. Взаиморасположение бластомеров складывается в результате последовательных митотических делений: на месте одного бластомера оказываются два. Поэтому традиционные обозначения бластомеров, отражающие генеалогию, могут считаться их своеобразными координатами на поверхности бластулы (рис. 3 а, в, г). Вместе с тем, эмбриогенез протекает как процесс деления бластомеров, хотя и сохраняющих идентичные геномы, но приобретающих все более узкое перспективное значение. Каждое деление бластомеров – дихотомическое обособление перспективных свойств, изначально скрытых в зиготе. Реальная генеалогия бластомеров напоминает процесс дихотомического деления объема понятия в логике. Сходство становится наглядным после замены традиционных обозначений двоичными (рис. 3 г). Двоичным кодом уже были обозначены ячейки кругов Эйлера и диаграмм Венна для стадий 2^2 , 2^3 и 2^4 бластомеров (рис. 1 б, г) и, как следует из рис. 3 г, он пригоден для более поздних стадий $n > 4$ бластомеров.

Двоичные обозначения могут служить координатами ячеек диаграммы и граней полиэдра, но нет оснований допускать, что они отражают генеалогию. Действительно, число единиц в обозначении ячейки – это лишь число Пересекающихся фигур диаграммы (“плотность”) на месте, занятом ячейкой (рис. 7 а, в). Место, занятое единицей – это лишь указание на фигуру диаграммы (рис. 7 а). Наконец, ячейки различаются числом ребер. Оно колеблется от 3 до 4 (рис. 7 г). Все эти параметры не отражают генеалогии. Тем не менее, два ряда обозначений, традиционных и цифровых, равнозначны (рис. 3 г). Поэтому биологически содержательная синонимия обозначений (рис. 7 а, д) возможна.

С возможностью такого соответствия следует считаться не только по причине равночисленности граней (ячеек) у реальной бластулы и ее “логической мо-

дели". Следует считаться с наличием у обоих трехмерных тел элементов радиальной осевой симметрии (рис. 7 б). Она сохраняется на плоских диаграммах (рис. 7 д, е). О симметрии говорит размещение равных ячеек, только треугольных или 4-угольных, а также обозначений с одинаковым числом единиц или нулей (рис. 7 а, в). Они размещены симметрично вокруг центра α диаграммы и оси $\alpha\beta$ полиэдра "логической модели". Поэтому, хотя симметрия диаграммы и полиэдра "логической модели" задана геометрическим построением и в этом смысле формальна, она может соответствовать биологически содержательной осевой симметрии реальной бластулы. Ось симметрии $\alpha\beta$ полиэдра "логической модели" может отвечать анимально-вегетативной оси реальной бластулы. Вокруг оси $\alpha\beta$ можно воспроизвести преобразование сдвига (рис. 6) и поворота секторов полиэдра (рис. 5 к-м).

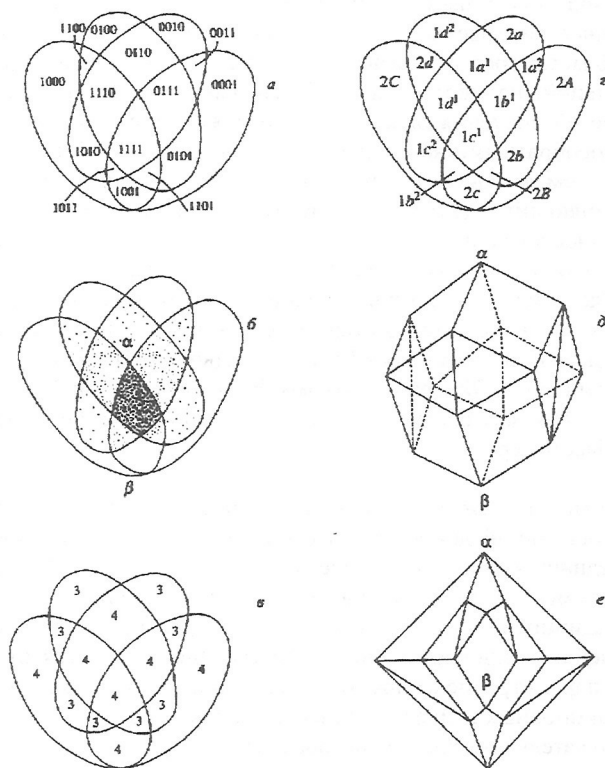


Рис. 7. Логическое деление общего понятия на диаграмме Венна (а - е), из 2^4 ячеек, считая внешнюю (0000), и проекции Шлегеля (д), е - "логический полиэдр".

Результатом топологического преобразования "логической модели" может стать пространственная организация реальной бластулы с ее гранным символом и характеристикой Эйлера. Такое преобразование послужило бы ключом для расшифровки двоичных обозначений. В этом случае "ог-

гранка" реальной бластулы и ее симметрия получили бы биологическую трактовку: огранка бластулы - наглядный результат умозри-

тельного логического деления общего объема наследственной информации о перспективном значении бластомеров. Технические трудности преобразования, возможно, преодолимы с помощью компьютера.

Закключение

Четыре рисунка по-разному представляют перспективные значения бластомеров, изначально сосредоточенные в зиготе. Как геометрические образы, они вызывают разные ассоциации. **Первый** (рис. 3 г) показывает одномерную упорядоченность обозначений, традиционных и двоичных, для каждой из четырех стадий дробления. Каждая строка символов может вызывать ассоциации с линейной упорядоченностью одной и той же наследственной информации в геноме зиготы. Кроме того, рис. 3 г наглядно изображает мыслительный процесс дихотомического деления общего понятия и реальный процесс обособления перспективных значений бластомеров. Подчеркнем, что процесс протекает на неевклидовой поверхности сферы.

Второй (рис. 5 н, о) показывает “простую модель” на неевклидовой поверхности сферы. Как отмечено выше, число ячеек у “простой модели” меньше реально имеющихся у ранних стадий 2^n бластомеров (табл. 1). Поэтому, начиная с $n = 4$, “простая модель” непригодна для изображения логического деления общего понятия. Т.е. отображение линейно упорядоченной информации происходит не на пересечениях полусфер, а “огранка” реальной бластулы со стадии $n = 4$ не представима пересечениями полусфер. **Третий** (рис. 6 а, в-д) изображает на плоских диаграммах двумерную упорядоченность результатов логического деления общего понятия. Результаты представляются плоскими ячейками. Эта упорядоченность формальна, т.е. задана построением диаграммы, и наглядна благодаря симметричному (вокруг оси $\alpha\beta$) размещению ячеек, наделенных перечисленными выше свойствами.

Четвертый (рис. 6 б) изображает полиэдр, ранее названный “логической моделью”. Огранка полиэдра – это перенесенная на поверхность трехмерного тела диаграмма Венна. Одной из 2^4 граней полиэдра служит внешняя ячейка 0000 диаграммы. Поверхность полиэдра подготовлена для размещения всей перспективной информации, распределенной среди 2^4 бластомеров. Такой полиэдр может отвечать бластуле на стадии 2^4 бластомеров (рис. 3 а-в), хотя ячейки полиэдра существенно отличаются от реальных бластомеров рядом топологических свойств. Для “логических” полиэдров существует проекция Шлегеля, на которой удобно воспроизвести бластокинез. Целью такого преобразования служит проекция Шлегеля для реальной бластулы. Среди кристаллических форм имеются октаэдры и тетраэдры, возможны формы со свойствами и других реальных стадий развития. Но это обстоятельство не может служить поводом для отрицания гипотезы о генетико-

информационном значении огранки бластулы. Сходным образом “огранка” упоминавшихся колоний *Pandorina*, близкая к огранке реальных бластул, свидетельствует о возможном параллелизме при отсутствии родства между биоморфами.

”Генетические факторы сами по себе лишены однозначного морфогенетического смысла; они приобретают его лишь в контексте определенных структурно-устойчивых динамических схем морфогенеза” (Белоусов, 1987, с. 221). Что касается упоминаемой в цитате структуры, то ею может служить неевклидова поверхность. Это – чисто топологический, внешний фактор дробления. Благодаря ему, упорядоченная наследственная информация, заключенная в геноме, преобразуется в целостную огранку неевклидовой поверхности бластулы. Вместе с “генетическими факторами” в принципы морфогенеза, сформулированные Белоусовым, привнесена безальтернативная ныне концепция дискретности генотипа. Она восходит к классическим опытам Г. Менделя, остается основой теории эволюции и обсуждается в рамках далекого от решения вопроса о воплощении генов в дискретных признаках фенотипа (Том, 2002; Черданцев, 2003). Дискретное видение фенотипа, усвоенное традиционной систематикой, осуществлено в любом таксономическом диагнозе. Своим видением форм систематика остается дискретной биоморфологией, которая, в свою очередь, опирается на концепцию дискретной наследственности: дискретность фенотипа – от дискретности генотипа.

Концепция альтернативной континуальной биоморфологии заключена в выражении “форма – от формы, симметрия – от симметрии” (Заренков, 1997). В этом выражении подразумевается возможность преобразования линейной структуры “генетического фактора” наследственности в целостную огранку бластулы. Его результат не следует понимать как отпечаток папиллярного узора пальца, который в данном случае сравнивается с геномом. Бластула – это “живой кристалл” в том смысле, что его огранка, доступная обычному наблюдению, свидетельствует о внутренних собственных причинах огранки. Сходным образом в кристаллохимии огранка кристаллов рассматривается как результат межатомных взаимодействий, в свою очередь обусловленных строением самих атомов. Механизм преобразования структуры атомов в огранку кристаллов может служить поводом для размышлений о механизме осуществления генотипа в фенотип. Таким образом, имеются основания трактовать элементы симметрии бластулы как собственные в смысле принципа Кюри. Поэтому выражение “живые кристаллы” применительно к стадиям дробления не следует считать лишь образной формулой. Что касается последующего органогенеза, то это изменение иного рода, поскольку протекает у организма, активно осуществляющего обмен веществ.

Список литературы

- Белоусов Л.В. Введение в общую эмбриологию. М.: Изд-во МГУ, 1980. 211 с.
- Белоусов Л.В. Биологический морфогенез. М.: Изд-во МГУ, 1987. 236 с.
- Болтянский В.Г. Равновеликие и равноставленные фигуры. М.: Наука, 1956. 64 с.
- Войтеховский Ю.Л. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Volvocaceae) // Журн. общ. биол. 2001. Т. 62. № 5. С. 425-429.
- Гарднер М. Математические головоломки и развлечения. М.: Изд-во "Оникс", 1994. 510 с.
- Гуреева М.А. Материалы к эмбриональному развитию *Nereilinum murmanicum* Ivanov, 1969 (Pogonophora) // Тр. Зоол. ин-та АН СССР. 1979. Т. 84. С. 63-72.
- Гуреева М.А. Сравнительный анализ топологических свойств спирального и радиального дробления // Тр. ЛОЕ. 1991. Т. 89. № 1. С. 136-152.
- Долбилин Н.П. Жемчужины теории многогранников. М.: Изд-во Московского центра непрерывного мат. образования, 2000. 40 с.
- Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов. М.: ГЕОС, 2000. 394 с.
- Заренков Н.А. Арифмологические основы биоморфологии // Журн. общ. биол. 1997. Т. 58. № 5. С. 5-25.
- Заренков Н.А. Опыт построения семиотической теории жизни и биологии // Синергетика. Семиотика. Козволюция. М.: УРСС, 2001. С. 190-209.
- Зенкевич Л.А. Очерки эволюции аппарата движения животных. I. Некоторые общие аспекты эволюции движения животных // Журн. общ. биол. 1944. Т. 56. № 3. С. 129-178.
- Иванова-Казас О.М. Сравнительная эмбриология беспозвоночных животных. Трохофорные, щупальцевые, щетинкочелюстные, погонофоры. М.: Наука, 1977. 312 с.
- Иванова-Казас О.М. Сравнительная эмбриология беспозвоночных животных. Иглокожие и полухордовые. М.: Наука, 1978. 166 с.
- Иванова-Казас О.М. Эволюционная эмбриология животных. СПб.: Наука, 1995. 565 с.
- Кондаков Н.И. Логический словарь. М.: Наука, 1971. 656 с.
- Кузичев А.С. Диаграммы Венна. М.: Наука, 1968. 252 с.
- Маресин В.М. Геометрия формирования биологических тканей // Математическая биология развития. М.: Наука, 1982. С. 112-126.
- Маресин В.М. Пространственная организация морфогенеза. М.: Наука, 1990. 168 с.
- Мешеряков В.Н., Белоусов Л.В. Пространственная организация дробления // Итоги науки и техники. Т.8. М.: ВИНТИ, 1978. 100 с.
- Преснов Е.В., Исаева В.В. Перестройки топологии при морфогенезе. М.: Наука, 1985. 189 с.
- Смолянинов В.В. Математические модели биологических тканей. М.: Наука, 1980. 366 с.
- Смолянинов В.В. Модель роста колонии вольвокс // Онтогенез. 1972. Т. 3. № 3. С. 299-307.
- Сонин А.С. Постигание совершенства. М.: Знание, 1987. 207 с.
- Том Р. Структурная устойчивость и морфогенез. М.: Логос, 2002. 280 с.

Черданцев В.Г. Морфогенез и эволюция. М.: Товарищество научных изданий КМК, 2003. 360 с.

Шашкин Ю.А. Эйлерова характеристика. М.: Наука, 1984. 95 с.

Шубников А.В. Симметрия и антисимметрия конечных фигур. М.: Изд-во АН СССР, 1951. 172 с.

Korn R.W. The changing shape of plant cells: transformations during cell proliferation // Ann. Bot. 1980. V 46, N 6. P 649-666.

Morris V.B., Dixon K.E., Cown D.R. The topology of cleavage patterns with examples from embryos of Nereis, Styela and Xenopus // Phil. Trans. London. Ser.B. 1989. V 325. P 1-188.

Robert A. Recherches sur la développement des Troques // Arch. zool. exp. et gen. 1902. Ser. 3. V 10. P 269-538.

Siewing R. Lehrbuch der vergleichenden Entwicklungsgechichte der Tiere. Hamburg, 1969. 333 S.

Секционные доклады

Кристаллография



А. Дюрер (1471-1528). Меланхолия (1514).

О ПРАВИЛЬНЫХ ЗВЕЗДНЫХ МНОГОГРАННИКАХ В ПРОСТРАНСТВЕ ЛОБАЧЕВСКОГО

Ф.Л. Дамиан¹, П.В. Макаров²

¹ Молдавский государственный университет, Кишинев

² Московский государственный горный университет, Москва

К указанному в заголовке вопросу нас привели, хотя и с разных сторон, научные интересы: первый автор использовал звездные многогранники для изучения геометрии подмногообразий, вложенных в трехмерные и четырехмерные гиперболические многообразия, второй изучал многогранники с правильными гранями в гиперболическом пространстве. Результат этой работы – некоторые новые звездные многогранники, которые, возможно, окажутся полезными при дальнейших исследованиях.

Начнем с двух относительно простых примеров использования (конечных) правильных звездных многогранников для изучения геометрии вложенных подмногообразий [2]. На двумерном ориентируемом многообразии рода 4 хорошо известна своей симметричностью правильная карта из 12 пятиугольников, сходящихся по пять в вершине [2, 3]. Если в качестве клеток карты взять правильные гиперболические пятиугольники с углом $2\pi/5$, то получим компактное гиперболическое двумерное многообразие M^2 , обладающее богатой группой симметрии порядка 240. Но схема склейки его карты совпадает со схемой инцидентий граней правильного звездного многогранника, обозначаемого в символике Шлефли $(5, 5/2)$ и называемого большим додекаэдром [3, с. 96]. Он имеет в качестве граней двадцать выпуклых пятиугольников, звездно сходящихся по пять в каждой вершине. Многогранник $(5, 5/2)$ можно получить продолжением граней обычного выпуклого правильного додекаэдра. Каждую грань надо продолжить до тех пор, пока она не пересечется с пятью плоскостями тех граней, которые смежны по ребрам с гранью, противоположной данной [4]. Но при увеличении размеров многогранника $(5, 5/2)$ плоский угол его грани будет варьировать от его евклидовой величины (108°) до нуля и, следовательно, в некоторый момент станет равным $2\pi/5$, т.е. такому углу, какой и должен быть у пятиугольников указанной карты. Такое представление поверхности M^2 через звездный многогранник $(5, 5/2)$ значительно нагляднее описывает симметрию карты и позволяет легко строить ее развертки. Оказывается, многообразие M^2 естественным образом (с самопересечениями) вложено в гиперболическое пространство Зейферта-Вебера [5] и переходит в себя при всех движениях этого многообразия.

Многообразие Зейферта-Вебера обычно задается отождествлением противоположных граней правильного гиперболического додекаэдра с двугранным углом $2\pi/5$, одинаково ориентируемыми винтовыми движениями с углом по-

вороты $3\pi/10$. Выделим какую-нибудь грань додекаэдра и плоскости граней, смежные с ней по ребру. Ввиду правильности многогранника и выбора его двугранного угла, указанные плоскости принадлежат к одной гиперболической связке, а выбранная грань и центр додекаэдра лежат по разные стороны от базовой плоскости связки. Базовая плоскость связки пересекает додекаэдр по правильному пятиугольнику с углом $2\pi/5$. Условимся называть такой пятиугольник *базовым* или *узким*. Так как грань бралась произвольно, то для каждой пятиугольной грани додекаэдра существует соответствующая ей базовая плоскость и базовый пятиугольник. При отождествлении граней додекаэдра базовые плоскости оказываются идущими одна в продолжении другой, т.к. они ортогонально и одинаковым образом пересекают грани додекаэдра. Отождествление граней додекаэдра влечет отождествление сторон базовых пятиугольников. Ввиду тривиальности циклов ребер гиперболического пространства правильного додекаэдра и ортогональности базовых плоскостей ребрам, образующие циклы вершин (базовых пятиугольников) также оказываются тривиальными. Полученное 2-многообразие совпадает с указанным выше многообразием рода 4. Авторы [3, с. 147] указывают, что фактически уже Кеплер в 1619 г., открыв существование звездного многогранника, указал карту этого многообразия. В [1] указаны компактные гиперболические 3-многообразия, в которые оно вложено без самопересечения.

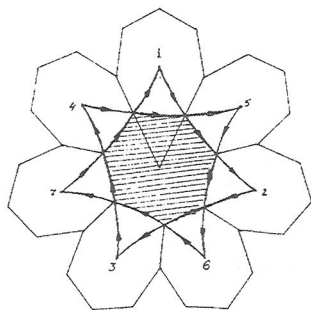


Рис. 1. Пояснения в тексте.

Второй пример, подробно разобранный в [2], показывает, что четырехмерное пространство правильного 120-гранника (многообразие Дэвиса) таким же способом (с самопересечениями) содержит в себе гиперболическое 3-многообразие, полученное из 120 правильных додекаэдров с двугранным углом $2\pi/5$ путем склейки по граням, определяемой

схемой инцидентий правильного звездного четырехмерного многогранника $\{5, 3, 5/2\}$. Не углубляясь слишком далеко в тему, заметим, что в пространстве Лобачевского существует бесконечно много правильных бесконечных многогранников (описанных около пар эквидистантных поверхностей и орисфер). Естественно использовать их для получения звездных правильных бесконечных многогранников. Ниже приведен лишь один пример построения таких многогранников (без использования приемов построения правильно-гранных многогранников).

Возьмем разбиение плоскости Λ^2 на правильные равные семиугольники (k -угольники, где k простое) и «озвездим» его клетки, беря пересечения сторон через один. Тогда каждый 7-угольник породит звездный 7-угольник $\{7/2\}$ (рис. 1). Если эту конструкцию из звездных 7-угольников поднять на эквидистантную поверхность, то получится вписанный в нее правильный звездный бесконечный эквидистантный многогранник, гранями которого будут указанные звездные 7-угольники. В вершинах они образуют семигранные правильные гоноэдры. Если поступить с разбиением $\{7, 3\}$ плоскости Лобачевского тем же образом, что и с разбиением сферы на пятиугольники, т.е. с правильным додекаэдром при получении из него звездного додекаэдра $\{5, 5/2\}$, то получим над правильным эквидистантным многогранником звездный эквидистантный многогранник $\{7, 7/2\}$, фрагмент которого (вместе с фрагментом ядра) показан на рис. 2.

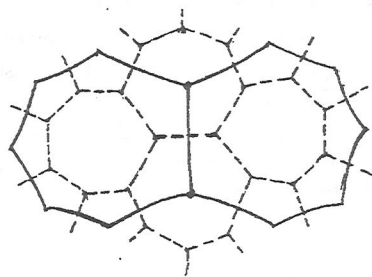


Рис. 2. Пояснения в тексте.

Работа поддержана грантом РФФИ – АН Молдова 06-01-90-845.

Список литературы

1. Дамиан Ф.Л., Макаров В.С. О трехмерных гиперболических многообразиях с икосаэдрической симметрией // Изв. АН РМ. Математика. № 1 (17). Кишинев: Штиинца, 1995. С. 82-89.
2. Дамиан Ф.Л., Макаров В.С. Правильные звездные многогранники и трехмерные гиперболические многообразия. Препринт. Кишинев: Институт математики АН РМ., 1997. 18 с.
3. Коксетер Г.С.М., Мозер У.О.Дж. Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп. М.: Наука, 1980. 240 с.
4. Fejes T. Regular Figures. London: Pergamon Press, 1964.
5. Seifert H., Weber C. Die beiden Dodekaederraume // Math. Ztschr. 1933. Bd 35. S. 237-253.

АВТОМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ФОТОГНОМОГРАММ: ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

**Р.В. Корсков. Санкт-Петербургский государственный горный институт
(технический университет). Санкт-Петербург**

В современной геологии морфометрические параметры кристаллов и агрегатов используются в существенно меньшей степени, чем, например, химический состав. Это связано со сложностью в измерении и представлении облика кристаллов. Для более полного использования морфометрических данных необходимы быстрые и надёжные методы регистрации форм кристаллов в виде, пригодном для автоматической обработки. Фотогониометрия позволяет относительно легко получать символы граней, но ручная обработка снимков остаётся длительным и трудоёмким процессом, что ограничивает её использование узкими задачами. Предлагаемый комплекс программ позволяет снизить время обработки больших объёмов фактического материала.

Фотогномограммы, полученные на зеркальном фотогониометре, однотипном с предложенным в [2], хранятся и обрабатываются в PGM формате (URL:<http://netpbm.sourceforge.net/doc/pgm.html>). Он выбран из-за широкого распространения и надёжности, представления изображений без потери информации и использования библиотеки на условии лицензии GPLv2 (URL:<http://www.gnu.org/licenses/gpl.txt>), что не ограничивает использование зависимых программ для научных и практических задач. Фотогномограммы проходят следующую обработку: (1) удаление шума, (2) поиск рефлексов как замкнутых областей, (3) вычисление центров и относительных площадей рефлексов, (4) вычисление векторов нормалей к граням, давшим рефлекс. Полученная для рефлекса пара "нормаль-площадь" используется для вычисления кристаллографических символов рефлекса (грани) и, что является конечной целью, построения многогранника – модели кристалла [1, 4].

Так как границы рефлексов на фотогномограммах в большинстве случаев нерезкие, требуется предварительная очистка изображения от информационного шума. Поскольку суммарная площадь рефлексов существенно меньше площади снимка, можно применить хорошо зарекомендовавший себя в обработке статистических данных метод "трёх сигм". Для этого по всему изображению вычисляется среднее m и стандартное отклонение σ . Все точки, имеющие интенсивность в интервале $[m-3\sigma; m+3\sigma]$, считаются фоном и удаляются из рассмотрения. Из-за особенностей распределения интенсивностей на фотогномограммах значимо заполненным является один из краевых интервалов. На практике оказалось целесообразным использовать множитель не 3, а e – при этом сохраняются достаточно слабые рефлексы.

В обработанном таким образом массиве данных осуществляется поиск замкнутых областей – рефлексов граней. Для этого используется алгоритм, предложенный в [3] – “Connected Components Labeling”. Изображение построчно сканируется, для каждой точки p проверяются 8 ближайших и строится список примыкающих областей $N_{m=0..7}$. Если N пуст, p помечается как новая область. Если N не пуст, p приписывается к области N_0 . Если N содержит больше одного элемента, области $N_1..N_m$ объединяются с N_0 . Сканирование продолжается до конца изображения. Для каждого рефлекса вычисляется центр (центр масс составляющих точек) и площадь (число точек).

Заключительная часть состоит в вычислении нормали к грани, давшей рефлекс. Для этого используется расположение кристалла в фокусе параболического зеркала и то, что в центре фотогномограммы расположена тень от кристаллодержателя. Центр тени принимается за проекцию точки пересечения координатных осей фотогониометра. Если он не может быть выделен, за центр принимается среднее арифметическое центров рефлексов. Координата по оси, перпендикулярной к плоскости изображения, вычисляется следующим образом. Пусть рефлекс имеет координаты (y, z) , тогда $a = (y^2 + z^2)^{0.5}$, из уравнения параболы $a = (2px)^{0.5}$, после преобразований и переноса фокуса в центр координат $x = a^2 / 2p - p/2$, из чего полярные координаты равны $r = (0.5 p/x)^{0.5}$; $q = a \operatorname{tg} (y/z)$. Результаты могут использоваться непосредственно или для построения модели кристалла.

Программы находятся в разработке, но уже функциональны и устойчивы. По окончании отладки они будут доступны на условиях лицензии GPLv2. В перспективе – разработка бесплечной конструкции фотогониометра, что уменьшит паузу между измерением кристалла и результатом. Необходимы более эффективные алгоритмы обработки изображения: динамическое определение шумового порога, разделение близких рефлексов, автоматическое сведение информации от нескольких снимков кристалла при различных его ориентировках относительно оптической оси фотогониометра.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Макаров М.С. Описание формы кристалла и теорема Минковского // Фёдоровская сессия. Тез. докл. СПб, 2006. С. 13-15.
2. Глазов А.И. Методы морфометрии кристаллов. Л.: Недра, 1981. 147 с.
3. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1978. 832 с.
4. Корсков Р.В. Построение модели кристаллического многогранника, заданного символами граней и их площадями // Фёдоровская сессия. Тез. докл. СПб, 2006. С. 21-23.
5. Hypermedia image processing reference. <http://homepages.inf.ed.ac.uk/rbf/HIPR2>.

РАЗБИЕНИЯ ТРЕХМЕРНОЙ СФЕРЫ И СРАСТАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗЁРЕН

Я.В. Кучериненко. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

В работе показано, что множество различных описаний (движений), задающих взаимную ориентацию двух сросшихся кристаллических зёрен, связанное с симметрией каждого индивида, изоморфно правильной системе точек, симметричной относительно определённой группы симметрии, действующей на 3-мерной сфере (4-мерной точечной группы). Разбиения Дирихле-Вороного, построенные на некоторых орбитах этой группы, позволяют наглядно представить решение ряда задач, связанных с описанием, сравнением и статистикой ориентировок кристаллических зёрен. Предложенный метод, использующий аппарат кватернионов, подходит для кристаллов и любых двух фигур, сориентированных в пространстве некоторым образом. Для фигур на плоскости применим аналогичный аппарат, использующий комплексные числа и окружность. Аналогичный результат получен для описания взаимных ориентаций двух фигур в n -мерном пространстве. В этом случае для описания поворотов I и II рода применяются ортогональные матрицы $n \times n$, которые изображаются точками в n^2 -мерном пространстве. Множество точек, соответствующих взаимной ориентации n -мерных фигур, является правильной системой. Метод переносится на описания взаимных расположений двух фигур на сфере и отчасти (с сохранением алгебраического аппарата при потере геометрической правильности систем точек) в евклидовом пространстве и пространстве Лобачевского, для описания движений в которых можно использовать матрицы $(n+1) \times (n+1)$.

Некоторые сведения о разбиениях сферы. Разбиения сферы на многоугольники можно представить как проекции многогранников. На рис. 1 даны куб и связанное с ним разбиение сферы на 6 правильных 4-угольников. Ребра разбиений – дуги больших кругов (рис. 2), кратчайшие (геодезические) линии на сфере. Сумма углов выпуклого n -угольника на сфере больше, чем $\pi(n-2)$, что хорошо видно на рис. 1 справа, где все углы 4-угольника равны 120° , и на рис. 2, где видны треугольники с углами по 90° , соответствующие граням правильного октаэдра.

Пусть на сфере имеется конечное множество точек X . Тогда разбиение Делоне множества X – это проекция его выпуклой оболочки на сферу, а разбиение Дирихле-Вороного – проекция многогранника, ограниченного множеством плоскостей, касательных к сфере в точках множества X (рис. 3). Это утверждение верно, если точки расположены на сфере достаточно плотно, чтобы их выпуклая оболочка была многогранником и содержала внутри центр сфе-

ры. В других случаях, назовём их вырожденными, такая связь имеется, хотя и менее очевидна.

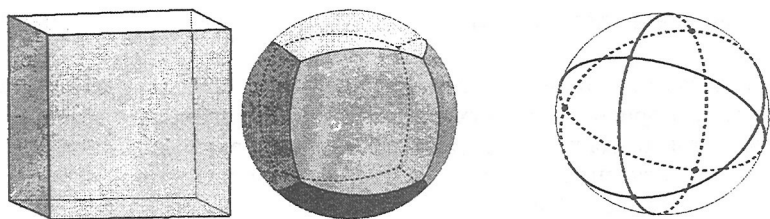


Рис. 1 (слева). Куб и его проекция – разбиение сферы на правильные 4-угольники.

Рис. 2 (справа). Разбиение сферы на треугольники. Рёбра – дуги больших кругов.

Приведённые рисунки связаны с разбиениями на двумерной сфере в том смысле, что положение точки на поверхности 3-мерного шара может быть задано двумя координатами, например, широтой и долготой. Окружность (границу двумерного круга) можно назвать 1-мерной сферой. В общем случае n -мерная сфера является границей $(n+1)$ -мерного шара. Один из методов задания сфер размерностей 1, 2 и 3 при помощи координат дан в табл. 1.

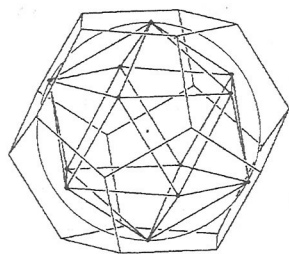


Рис. 3 Точки множества X расположены на сфере в вершинах икосаэдра. Выпуклая оболочка X – сам икосаэдр. Если его спроецировать на сферу, получим разбиение Делоне множества X (разбиение сферы на 20 правильных треугольников). Множество плоскостей, касательных к сфере в точках X , образуют додекаэдр. Если его спроецировать на сферу, получим разбиение Дирихле-Вороного множества X (разбиение сферы на 12 правильных 5-угольников).

3-мерной сферой является множество точек, равноудалённых от данной в 4-мерном пространстве ($x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1$). Разбиения на 3-мерной сфере связаны с 4-мерными многогранниками. Их представить трудно, но легко представить проекцию Шлегеля [7], т.к. она является 3-мерной конструкцией. Способ проецирования показан на рис. 4 на примере 3-мерного куба, спроецированного на плоскость, и на рис. 5 – примеры проекций 4-мерных многогранников, соответствующих разбиениям 3-мерной сферы.

Интересные особенности правильных разбиений 3-мерной сферы описаны в работе [1]. В отличие от правильных разбиений 3-мерного евклидова пространства, 3-мерная грань правильного разбиения сферы может иметь конечное, но сколь угодно большое число 2-мерных граней. Другая особенность, отличающая правильные разбиения 3-мерной сферы (или 4-мерных простых

форм) от 2-мерных правильных разбиений сферы (3-мерных простых форм) является наличие для многих 4-мерных точечных групп нескольких различных простых форм общего типа для одной и той же группы симметрии. Кроме того, границы областей общего типа не всегда линейны.

Таблица 1. Задание n -мерной сферы с помощью n параметров, $n = 1, 2, 3$.

$[\sin\varphi, \cos\varphi],$ $\varphi = 0 \dots 2\pi$	Задание 1-мерной сферы (окружности) на плоскости ($S^1 \subset E^2$) связано с комплексным числом $\cos\varphi + i \sin\varphi$, задающим поворот плоскости на угол φ . ¹
$[\sin\varphi \sin\rho, \cos\varphi \sin\rho, \cos\rho],$ $\varphi = 0 \dots 2\pi, \rho = 0 \dots \pi$	2-мерная сфера в 3-мерном пространстве (граница 3-мерного шара) $S^2 \subset E^3$
$[\sin\varphi \sin\rho \sin\theta, \cos\varphi \sin\rho \sin\theta, \cos\rho \sin\theta, \cos\theta],$ $\varphi = 0 \dots 2\pi, \rho = 0 \dots \pi, \theta = 0 \dots \pi$	3-мерная сфера в 4-мерном пространстве $S^3 \subset E^4$
$[\sin\varphi \sin\rho \sin\theta/2, \cos\varphi \sin\rho \sin\theta/2, \cos\rho \sin\theta/2, \cos\theta/2],$ $\varphi = 0 \dots 2\pi, \rho = 0 \dots \pi, \theta = 0 \dots 2\pi$	Другое задание 3-мерной сферы в E^4 , связанное с кватернионом вида $ix\sin\theta/2 + jy\sin\theta/2 + kz\sin\theta/2 + \cos\theta/2$, соответствующим повороту в 3-мерном пространстве на угол θ вокруг оси $[x, y, z]$. ($x^2 + y^2 + z^2 = 1$).
¹ Задание поворотов на плоскости комплексными числами и в 3-мерном пространстве кватернионами хорошо тем, что при умножении двух комплексных чисел (кватернионов) полученный результат задаёт поворот, соответствующий последовательному применению исходных поворотов. Кватернионы перемножаются согласно правилам $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$, $ij = -ji = k$, $jk = -kj = i$, $ki = -ik = j$. Для умножения комплексных чисел достаточно знать, что $i^2 = -1$.	

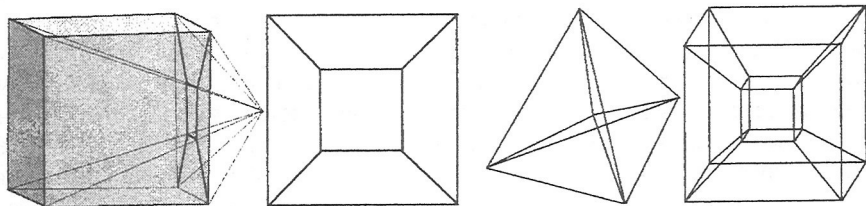


Рис. 4 (слева). Построение проекции Шлегеля 3-мерного куба на 2-мерной плоскости. Выбираем точку напротив грани и соединяем с ней все точки поверхности многогранника. Проекция Шлегеля есть результат пересечения этих отрезков с плоскостью грани. Все вершины, рёбра и грани проецируются на плоскость.

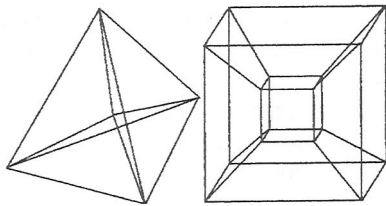


Рис. 5 (справа). Проекция Шлегеля 4-мерных симплекса и куба в E^3 . Первая соответствует разбиению 3-мерной сферы на 5 тетраэдров, вторая – на 8 кубов.

Закономерности описания двух сросшихся кристаллических зёрен. В связи с автоматизацией методов изучения текстур материалов стала актуальной задача различного описания взаимной ориентации индивидов одного и того же сростка или кристаллического двойника. Это связано с тем, что кристаллы обладают симметрией – движениями, совмещающими их с собой.

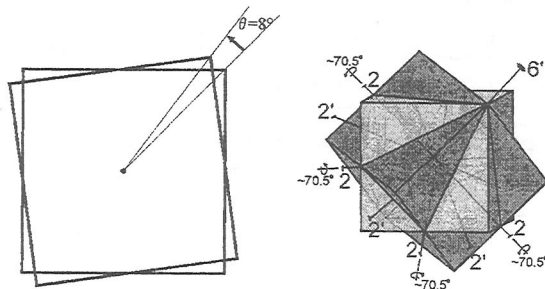


Рис. 6 (слева). 2-мерная модель тетрагональных кристаллов, разориентированных на 8° . Повороты на 98° , 188° и 278° задают такую же взаимную ориентацию зёрен.

Рис. 7 (справа). Двойник прорастания по шпинелевому закону (характерен для шпинели, флюорита, лопарита, алмаза). Приведенная взаимная ориентация индивидов может быть задана 192-мя способами.

На рис. 6 дана модель двух 2-мерных тетрагональных кристаллов. Это простой случай, сросток можно получить поворотами одного кристалла на 8° , 98° , 188° и 278° . При этом повороты в обратную сторону и отражения в 4 плоскостях приводят к тому же результату. Зная об одной операции, приводящей к нужной ориентации кристаллов, можно получить все остальные. Для 3-мерных кристаллов (особенно с высокой симметрией, например, кубических), даже в простом случае двойника по шпинелевому закону (рис. 7) имеется 192 различных движения (повороты, инверсионные повороты и отражения в плоскостях), приводящих к этому закону двойникования. В общем случае, когда два одинаковых кристалла с симметрией куба ориентированы случайно, имеется 2304 различных движения, описывающих их взаимную ориентацию. Если есть два описания срастаний кристаллических зёрен, то не очевидно, описывают ли они одну взаимную ориентацию. Если же известны описания разных срастаний, то встаёт вопрос, насколько они различаются. Другой задачей [3] является изучение функций распределения минимальных углов поворотов, определяющих взаимную ориентацию кристаллических зёрен. Кроме того, как отличить срастания общего типа от специальных, когда кристаллические решетки сросшихся кристаллов имеют общую 2-мерную подрешетку. Первой проблеме посвящены следующие результаты.

Теорема 1. Пусть r — движение, задающее положение кристалла В относительно А. (Движение r перемещает кристалл В из его начального положения. Тождественное движение характеризует начальную установку кристаллов, выбираемую так, чтобы группы симметрии кристаллов записывались оптимально.) Тогда множество $\{a_i r b_j\}$, где перечислены все комбинации операций симметрии групп $\{a_i\}$ и $\{b_j\}$ кристаллов А и В, задаёт описания одного и того же взаимного расположения кристаллов.

Теорема 2. Если кристаллы А и В одинаковы, то движение r , задающее положение кристалла В относительно А, и обратное движение r^{-1} задают одно взаимное расположение кристаллов. Как следствие, $\{a_i r a_j\} \cup \{(a_i r a_j)^{-1}\}$ — множество движений, задающих то же взаимное расположение А и В, что и движение r .

Замечание 1. Если r характеризуется поворотом I или II рода и параллельным переносом, то в качестве групп симметрии кристаллов можно рассмотреть их пространственные группы. В этом случае решается задача об описании их сростков или двойников на масштабах размеров атомов. Если принять, что движение r всегда сохраняет начало координат, то рассматриваются точечные группы симметрии кристаллов, и речь идёт о множестве описаний одной взаимной ориентации кристаллов.

Замечание 2. Поскольку в доказательстве теорем 1 и 2 не используются особенности евклидова пространства, то обе теоремы верны и для кристаллов (фигур) на сфере, а также в пространстве Лобачевского.

Движения можно охарактеризовать разными способами, в т.ч. матрицами, кватернионами (повороты в E^3) и комплексными числами (повороты в E^2). Для всех представлений получены близкие результаты. В случаях, когда это возможно, приведём результаты, касающиеся движений и трёх их представлений. Для этого потребуются алгебраический аппарат, использующий операторы. Т.к. движения можно рассматривать как отображения или функции, то любые действия над ними можно назвать операторами. Так, умножение (последовательное применение) движения b и затем a можно записать в операторной форме $ab = P_a b = P'_b a$, где оператор P_a — умножающий слева, связанный с движением a , а P'_b — оператор, умножающий справа, связанный с движением b . Тогда последовательность движений arb можно записать в виде $arb = P_a P'_b r$, причём умножение операторов — их последовательное применение. Потребуется также ввести обращающий оператор R , переводящий каждое движение в обратное: $Ra = a^{-1}$. Незульят теоремы 1 можно записать в виде $\{P_{ai} P'_{bj} r\}$, а следствие из теоремы 2 — в виде $\{P_{ai} P'_{bj} r\} \cup \{R P_{ai} P'_{bj} r\}$.

Теорема 3. Движения, характеризующие одно взаимное расположение кристаллов (фигур) А и В, имеющих группы симметрии $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$, связаны группой операторов $\{P_{ai}P'_{bj}\}$, если А и В разные, или группой операторов $\{P_{ai}P'_{aj}\} \cup \{RP_{ai}P'_{aj}\}$, если они одинаковы. Доказательство состоит в проверке свойств, входящих в определение группы.

Замечание. Если группы $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$, конечны, то и группа $\{P_{ai}P'_{bj}\}$ конечна. Но это не означает, что для определения её порядка нужно перемножить порядки групп $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$, т.к. некоторые элементы вида $P_{ai}P'_{bj}$ могут совпасть. Так, если $\{a_i\} = \{b_i\} = \{1, -1\}$ – точечная группа с единственным элементом – центром симметрии (характерна для некоторых полевых шпатов), то $\{a_i b_j\} = \{r, -1r\}$, поскольку операция инверсии коммутирует с любыми движениями (при неподвижности начала координат, что автоматически обеспечивается при рассмотрении взаимных ориентаций кристаллов). Если рассматривается двойник триклинного полевого шпата или сросток одинаковых кристаллов, то, с учётом обратных движений, $\{a_i a_j\} \cup \{(a_i a_j)^{-1}\} = \{r, -1r, r^{-1}, -1r^{-1}\}$. Если группы $\{a_i\}$ и $\{b_i\}$ содержат центр симметрии, то для подсчёта порядка группы $\{P_{ai}P'_{bj}\}$ его достаточно учесть один раз. Другой пример – случайный сросток двух кристаллов с симметрией куба. Порядок группы равен 48, но она содержит центр симметрии, который следует учесть один раз. С учетом 24 вращений, учитываемых для каждого кристалла, и удвоения, связанного с учётом обратных движений, получаем их число, задающее взаимную ориентацию кристаллов, $24 \times 24 \times 2 = 2304$. Определяя взаимное расположение кристаллов А и В, мы рассматривали упорядоченную пару и определяли положение В относительно А. Что изменится, если рассмотреть положение А относительно В?

Лемма 1. При замене пары (А,В) на (В,А) и сохранении их положения в пространстве все движения, описывающие их взаимное расположение, обращаются. Группа $\{P_{ai}P'_{bj}\}$ меняется на $\{P'_{ai}P_{bj}\}$.

Точкой отсчёта при определении взаимных расположений кристаллов А и В является их начальное положение. Если кристаллы одинаковы, то можно принять, что в начальном положении они совпадают и ориентированы наиболее удобным образом относительно координатной системы (правильная установка кристалла). Если кристаллы разные, то выбор начального положения не очевиден. Как изменятся описания взаимных расположений кристаллов, если изменить их начальное положение?

Лемма 2. При замене начальных положений кристаллов (фигур) А и В движениями α и β множество движений, отвечающих одному их взаимному расположению, умножается на оператор $P_\alpha P'_{\beta-1}$.

Замечание. Лемма справедлива всегда – когда A и B различны или одинаковы.

Как выглядят операторы при представлении поворотов кватернионами? Кватернион, соответствующий повороту 3-мерного пространства вокруг оси $[x, y, z]$ ($x^2 + y^2 + z^2 = 1$) на угол θ , можно записать в виде $ix\sin\theta/2 + jy\sin\theta/2 + kz\sin\theta/2 + \cos\theta/2$. Обратный поворот имеет ту же ось, но противоположный угол, и ему соответствует кватернион того же вида, но первые три слагаемых поменяют знак. Таким образом, повороту можно сопоставить точку в четырёхмерном пространстве на сфере единичного радиуса (на самом деле – две точки, т.к. кватернион, умноженный на -1 , соответствует такому же повороту), а обрабатывающий оператор запишется в виде диагональной матрицы 4×4 , в которой три элемента диагонали равны -1 , а четвёртый – единице. Записав два поворота в виде кватернионов $ia_1 + ja_2 + ka_3 + a_4$, $ib_1 + jb_2 + kb_3 + b_4$ и перемножив их, получим:

$$(i, j, k, 1) \begin{pmatrix} a_4 & -a_3 & a_2 & a_1 \\ a_3 & a_4 & -a_1 & a_2 \\ -a_2 & a_1 & a_4 & a_3 \\ -a_1 & -a_2 & -a_3 & a_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = (i, j, k, 1) \begin{pmatrix} b_4 & b_3 & -b_2 & b_1 \\ -b_3 & b_4 & b_1 & b_2 \\ b_2 & -b_1 & b_4 & b_3 \\ -b_1 & -b_2 & -b_3 & b_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}$$

Представляя движения точками на 3-мерной сфере единичного радиуса в 4-мерном пространстве, операторы можно записать в виде:

$$P_a = \begin{pmatrix} a_4 & -a_3 & a_2 & a_1 \\ a_3 & a_4 & -a_1 & a_2 \\ -a_2 & a_1 & a_4 & a_3 \\ -a_1 & -a_2 & -a_3 & a_4 \end{pmatrix} P_b = \begin{pmatrix} b_4 & b_3 & -b_2 & b_1 \\ -b_3 & b_4 & b_1 & b_2 \\ b_2 & -b_1 & b_4 & b_3 \\ -b_1 & -b_2 & -b_3 & b_4 \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Эти матрицы ортогональны и задают повороты в 4-мерном пространстве. Группы операторов из теоремы 3 превращаются в 4-мерные точечные группы симметрии или в кристаллографические группы, действующие на 3-мерной сфере. Перестановка кристаллов в паре (A, B) в лемме 1 приводит к обращению всех движений – правильная система точек на 3-мерной сфере подвергается движению II рода с матрицей R . Замена начальных положений A и B движениями α и β в лемме 2 приводит к повороту правильной системы точек с матрицей вида $P_\alpha P'_{\beta^{-1}}$. Аналогично можно рассмотреть повороты на плоскости и их представления комплексными числами. В этом случае операторы представляются матрицами 2×2 , умножающие операторы коммутируют, а умножающие слева и справа выглядят одинаково для любого поворота. Но комплексные числа не позволяют учесть движения 2-го рода. Лучше обстоит

дело с описанием взаимных ориентаций 3-мерных кристаллов с помощью кватернионов. В этом случае движения 2-го рода можно представить инверсиями и задать их кватернионами и точками на 3-мерной сфере так же, как и для поворотов 1-го рода, отметив при этом, какого рода поворот имеется в виду. Тогда множество точек на 3-мерной сфере распадается на два сорта. Тем не менее, оно может быть описано в рамках одной группы с привлечением антисимметрии. Точки правильной системы, соответствующие поворотам одного рода, связаны операциями равенства, а точки, соответствующие поворотам разного рода – операциями антиравенства. Если хотя бы одна из точечных групп симметрии рассматриваемых кристаллов содержит центр симметрии, то соответствующая 4-мерная точечная группа антисимметрии будет «серой» (или старшей). Т.е. каждому движению равенства соответствует геометрически идентичное движение антиравенства, а каждая точка правильной системы соответствует как повороту, так и инверсионному повороту.

Разбиения Дирихле-Вороного позволяют наглядно представить действие групп симметрии на 3-мерной сфере. В частности, разбиения на правильных системах точек, порождённых точкой тождественного движения, представляет собой “элементарную ячейку” группы. Размножив соответствующие точки внутри “ячейки” и заполняя ими 3-мерное сферическое пространство, можно воссоздать правильную систему точек, задающих взаимную ориентацию пары кристаллов. Так, на рис. 8 дана ячейка разбиения 3-мерной сферы на усечённые кубы. Оно помогает представить расположение точек, задающих взаимную ориентацию двух кристаллов с симметрией куба. В частности, центры треугольных граней отвечают двойникованию по шпинелевому закону.

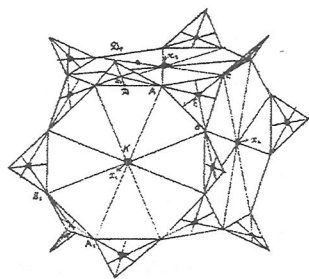


Рис. 8. Фрагмент разбиения 3-мерной сферы на усечённые кубы, являющегося разбиением Дирихле-Вороного на правильной системе точек в группе, связывающей эквивалентные описания взаимных ориентаций кристаллов с симметрией куба. Правильная система точек порождена исходной точкой, соответствующей параллельной ориентации кристаллов. Дополнительные треугольные грани показывают, что ячейки примыкают друг к другу по правильным 8-угольникам не “параллельно”, а с разворотом на 45° .

Центры ячеек соответствуют параллельно ориентированным кристаллам, центры треугольных граней – шпинелевым двойникам, вершины многогранников – максимальной величине разориентировки кристаллов. Рисунок взят из работы [1].

Расстояние между точками a и b на трёхмерной сфере (длина соответствующей хорды в 4-мерном пространстве) связано с величиной θ угла поворота в 3-мерном пространстве ab^{-1} (a и b – повороты в 3-мерном пространстве): $\rho^2 = \sum_1^4 (a_i - b_i)^2 = 4 \sin^2 \theta / 4$, откуда ясно, что расстояние между точками, измеренное непосредственно на 3-мерной сфере, связано с углом того же поворота.

Поэтому разбиения, аналогичные описанному, имеют важное значение не только для сравнения и описания взаимного расположения кристаллов, но и для изучения распределений разориентировок кристаллов при их случайных взаимных ориентациях.

Задание движений, описывающих взаимную ориентацию двух n -мерных кристаллов с помощью ортогональных матриц $n \times n$, также приводит к правильной системе точек, симметричной относительно n^2 -мерной точечной группы, а соответствующие операторы задаются ортогональными матрицами $n^2 \times n^2$. Расстояние между точками в этом пространстве также связано с величиной поворота: $\rho^2 = \sum_1^n (a_{ji} - b_{ji})^2 = 8 \sum_1^{[n/2]} \sin^2 \theta_i/2$. В частности, для $n=2$ и 3 каждому повороту соответствует только один угол и $\rho^2 = 8 \sin^2 \theta/2$. Это означает возможность применения разбиений сфер для описания взаимных ориентаций кристаллов и фигур в пространствах различных размерностей.

Движения и взаимные расположения фигур в общем виде в n -мерном евклидовом и гиперболическом пространствах задаются матрицами $(n+1) \times (n+1)$ и могут быть описаны аналогичным образом, но с потерей правильности системы точек в $(n+1)^2$ -мерном пространстве. Кроме того, обращающий оператор перестаёт быть линейным и не может быть представлен в виде матрицы. Если его применение необходимо, то можно сказать, что рассматриваются точки, соответствующие обратным движениям.

О специальных срастаниях двух одинаковых 3-мерных кубических кристаллов заметим, что координаты точек на 3-мерной сфере относятся друг к другу как целые числа, и наоборот. О специальных срастаниях и двойниках гексагональных кристаллов с осью 6-го порядка можно сказать, что приведённые повороты, попавшие внутрь области приведения (додекагональная призма), имеют целочисленные координаты оси поворота в координатной системе кристалла.

Форма областей приведения, соответствующих минимальным углам разориентировок, а также рациональность отношений компонент кватернионов, задающих специальные срастания кубических кристаллов, известна [2, 4-6]. В настоящей работе обнаружена возможность описания сростков не только одинаковых, но и разных кристаллов. В рассмотренном аспекте закономерности срастания двух кристаллов формулируются максимально ёмко как обобщение закона кристаллографической точечной симметрии. Удивительно, что для специальных срастаний кубических кристаллов выполняется и закон рациональных отношений. Теоретические исследования разбиений на 3-мерной сфере получают прикладное значение для описания срастаний реальных кристаллов. Становится понятным, как можно охватить всё множество описаний срастаний кристаллов на атомных масштабах. Аппарат обобщается на евкли-

довы пространства любой размерности, пространство Лобачевского и сферическое пространство.

Автор благодарит проф. **С.С. Рышкова**, на семинаре которого были доложены основные результаты и доказательства. Автор признателен также проф. **Н.П. Долбилин**у и проф. **В.С. Макарову** за обсуждение работы.

Список литературы

1. Долбилин Н.П. О правильных разбиениях Дирихле сферы. М.: Наука, 1972.
2. Frank F.C. Orientation Mapping // Metalurgical transactions. 1988. A19. P 403-408.
3. Handscomb D.C. On the random disorientation of two cubes // Canad. J. Math. 1958. V10. P 85-88.
4. Randle V. The measurement of grain boundary geometry. Pergamon Press: Bristol & Philadelphia, 1993.
5. Ranganathan S. On the Geometry of Coincidence-Site Lattices // Acta Cryst. 1966. V 21. P 197-199.
6. Sutton A.P., Balluffi R.W. Interfaces in Crystalline Materials. Oxford: Univ. Press, 1996.
7. Ziegler G. M. Lectures on Polytopes. Berlin: Springer-Verlag, 1995.

НОВОЕ О ПЛОТНЕЙШИХ ШАРОВЫХ УПАКОВКАХ

М.Е. Раменская. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

В работе дан способ расчёта межатомных расстояний в связи с рациональными направлениями в структурах, построенных по принципу плотнейших упаковок. Рассчитаны радиусы отталкивания (вторая координационная сфера) для большинства химических элементов (частично найдены В.Д. Hyde, частично опубликованы автором). Показано, что кристаллическая структура бинарного соединения A_nX_m определяется радиусами отталкивания R_A , R_X и длиной связи l . При этом атомы ведут себя как сферы по отношению к одноименным и другим атомам. Радиусы сфер следующим образом связаны через длину связи: $r_A = l - R_X$; $r_X = l - R_A$. В настоящее время в системах ионных радиусов используются лишь R анионов и r катионов Приложение теории бирадиальных упаковок М. Hollai (Венгрия) позволяет рассматривать любую бинарную структуру как систему двух бирадиальных упаковок, из которых по меньшей мере одна — плотнейшая. Новый параметр для атомов предлагается назвать радиусами Хайда-Холлаи или НН-радиусами.

Введение

Вершиной учения о плотнейших шаровых упаковках (ПУ) является "Синяя книга" Н.В. Белова [1]. Его представления о любой ПУ как чередовании плотнейших слоев g и k и 10 новых координационных многогранниках в структурах с крупными катионами позволяют использовать ПУ для расшифровки кристаллических структур и их описания. В наши дни, когда подавляющее большинство структур расшифровано, полученные данные стали средством дальнейших исследований. К таковым относится структурно-геометрический анализ граней (СГА), впервые предложенный Н.З. Евзиковой [2]. Удобный для решения морфологических вопросов, этот метод оказался незаменимым при исследовании взаимодействий кристалла со средой, что позволило качественно (отчасти — количественно) сравнивать грани и элементы среды. Потребовался переход и к количественным методам.

Расчет межатомных расстояний на гранях

В развитие СГА предлагается рассчитывать межатомные расстояния на гранях. Для этого необходимо и достаточно вычислить все межатомные расстояния в структуре, привязать каждую пару атомов к рациональному направлению и определить все рациональные направления на гранях. Межатомные расстояния определяются по формулам аналитической геометрии:

$$L = a^2(x_2 - x_1)^2 + b^2(y_2 - y_1)^2 + c^2(z_2 - z_1)^2 + 2ab(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)\cos\gamma +$$

$$+ 2bc(y_2 - y_1)(z_2 - z_1)\cos\alpha + 2ac(x_2 - x_1)(z_2 - z_1)\cos\beta$$

Структура, основанная на плотнейшей упаковке (ПУ), позволяет упростить расчет. В случае кубической упаковки расстояния вычисляются между центрами сфер и пустот, которые вместе образуют решетку. Центры октаэдрических пустот и сфер располагаются по примитивной решетке с параметром a , вдвое меньшим, чем у упаковки; центры тетраэдрических пустот центрируют её (рис. 1).

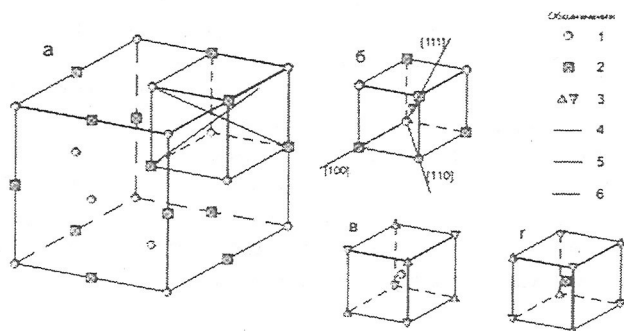


Рис. 1. Элементарная ячейка (э.я.) кубической ПУ. а) Центры сфер и октаэдрических пустот образуют общую Р-решётку с $a_R = a_F/2$. В выделенной э.я. Р-решётки показано место центрирующей тетраэдрической пустоты. б) э.я. F-решётки с началом координат в центре сферы. Положение центров сфер и октаэдрических пустот совершенно равноправно. в) и г) э.я. F-решётки с началом координат в тетраэдрической пустоте. Центры тетраэдрических пустот, связанных плоскостью π , расположены друг относительно друга, как центры сфер и октаэдрических пустот. Решётку центрируют центры сфер и октаэдрических пустот. Обозначения: 1. центр сферы; 2. центр октаэдрической пустоты; 3. центр тетраэдрической пустоты; 4. граница э.я. кубической ПУ; 5. граница э.я. решётки, общей для центров у сфер и пустот; 6. главные направления в кубической ПУ.

В результате имеется 3 типа направлений. Это направления T , где каждый узловой (структурный) ряд сложен центрами одного типа – расстояние между ними равно трансляции, а символы содержат одно четное число (рис. 1 б: $[110]$). Это направления $T/2$, где каждый узловой (структурный) ряд сложен центрами сфер и октаэдрических пустот или центрами тетраэдрических пустот, имеющих 2 разные ориентировки – их символы содержат по два чётных числа (рис. 1 б: $[100]$). Это направления $T/4$, где каждый узловой ряд проходит через центры сфер и обоих типов пустот – их символы состоят только из нечётных чисел (рис. 1 б: $[111]$). Таким образом, достаточно вычислить трансляцию по формуле:

$$T_{rst}^2 = a_P (r^2 + s^2 + t^2) = a_F (r^2 + s^2 + t^2) / 2$$

для направлений типа Т. Для направлений типов Т/2 и Т/4 трансляция составляет вдвое большую величину.

Минимальное межатомное расстояние составит Т, Т/2 или Т/4 в зависимости от типа направления. В табл. 1 даны коэффициенты для расчёта межатомных расстояний, связанных с рациональными направлениями, в кристаллах с кубической упаковкой (расстояния не превышают 2а упаковки). В реальных кристаллах, построенных по типу кубической плотнейшей упаковки, центры пустот не смещены независимо от того, заполнены пустоты атомами или нет. Поэтому межатомные расстояния либо равны расчётной величине, либо превышают её в целое число раз.

Таблица 1. Вычисления расстояний между позициями в кубической ПУ.

№	rst	Тип напр.	Значение Т в $a_{ку}$	
			формульное	числовое
1	001	Т/2	a	1,00000
2	110	Т	$a\sqrt{2}/2$	0,70711
3	111	Т/4	$a\sqrt{3}$	1,73205
4	112	Т	$a\sqrt{6}/2$	1,22474
5	113	Т/4	$a\sqrt{11}$	3,31662
6	114	Т	$3a\sqrt{2}/2$	2,12132
7	115	Т/4	$3a\sqrt{3}$	5,19615
8	117*	Т/4	$a\sqrt{51}$	7,14143
9	221	Т/2	$3a$	3,00000
10	331	Т/4	$a\sqrt{19}$	4,35890
11	335	Т/4	$a\sqrt{43}$	6,55744
12	553*	Т/4	$a\sqrt{59}$	7,68114
13	120	Т/2	$a\sqrt{5}$	2,23607
14	123	Т	$a\sqrt{14}/2$	1,87083
15	130	Т	$a\sqrt{10}/2$	1,58114
16	135	Т/4	$a\sqrt{35}$	5,91608
17	230	Т	$a\sqrt{13}$	3,60555

*Значение $T_{[117]} = T_{[551]}$; $T_{[553]} = T_{[137]}$

Для перехода к упаковкам с иным числом слоёв обратимся к кубической упаковке в установке Браве. Здесь единичным направлением является одна из осей 3-го порядка (направление типа Т/4 [111] кубической установки) – это трёхслойная упаковка ккк. Её решётка не является голоэдрической в своей системе. К тому же, даже сферы образуют правильную систему точек из двух подрешёток. Но т.к. в кубической установке мы имеем единую решётку, она

должна найтись и здесь. Это решетка, построенная с помощью плоскостей, параллельных сторонам гексагональной решётки Браве и проходящих через центры всех сфер и пустот. Ее узлы, находящиеся на пересечении плоскостей, образуют также ромбоэдрическую решётку, но центры сфер и пустот составляют в ней лишь $\frac{1}{3}$ всех узлов. С помощью этой решётки (назовём её вспомогательной – в.р.) определяются рациональные направления в установке Браве.

Таблица 2. Переход от символов направлений в кубической установке к символам в ромбоэдрической установке Браве.

Кубическая установка			Ромбоэдрическая установка
№	Символ направления	Кратность	Символ направления и (в скобках) кратность
1	100	6	02-21 (6)
2	110	12	10-11 (6), 11-20 (6)
3	111	8	0001 (2), 04-41 (6)
4	112	24	10-10 (6), 10-12 (6), 21-31 (12)
5	113	24	80-81 (6) 04-45 (6) 44-81 (12)
6	115	24	04-41 (6), 08-87 (6), 12.8. -20.1 (12),
7	117	24	04-43 (6), 0.16. -16.5 (6), 12.8.-20.1 (12)
8	221	24	20-21 (6), 20-25 (6), 62-81 (12)
9	331	24	40-47 (6), 80-85 (6), 8.4.-12.1 (12)
10	335	24	0.16. -16.1 (6), 4.0.-4.11 (6), 12.4.-16.5 (12)
11	551	24	8.0. -8.11 (6), 40-43 (6), 12.8. -20.1 (12)
12	553	24	4.0.-4.13, (6), 16.0. -16.7 (6), 8.12. -20.5 (12)
13	120	24	22-41 (12), 24-61 (12)
14	123	48	44-81 (12), 41-50 (12), 13-42 (12), 32-51 (12)
15	130	24	12-32 (12), 13-41 (12)
16	135	48	4.4. -8.3 (12), 8.8.-16.1 (12), 8.4.-12.7(12), 12.16.-28.1 (12)
17	137	48	4.4.-8.13 (12), 8.4.-12.11 (12), 16.12. -28.5 (12), 16.4.-20.1 (12),
18	230	24	22-41 (12), 62-85 (12)

Из рис. 2 видно, что направления, в которых минимальное расстояние между центрами сфер и пустот не превышают $2a$ упаковки в кубической установке, находятся в плоских сетках (10-10), (21-30), (11-20), (52-70) (41-50) и (71-80). Две первые содержат по одному структурному ряду [0001] (первая группа гомологичных плоскостей [3]), остальные – по три ряда (вторая группа гомологичных плоскостей). Внутри каждой группы индексы t у символов наклонных рядов совпадают. Графический перевод символов от кубической установки к ромбоэдрической для всех направлений, межатомное расстояние в которых не превышает $2a$ в кубической установке, дан в табл. 2.

Расстояние между позициями в установке Браве вычисляется из чисел мини-

мальных трансляций в.р. в направлениях $[rsw0]$ — $m T_{[в.р.rsw0]}$ и ячеек в.р. в высоту $h c/n$, где c — параметр структуры, n — число плоскостей 0001, проходящих через центры сфер и пустот в элементарной ячейке ПУ, (т.е. число ячеек в.р. в параметре c структуры), $m = 1$ или 3, по формуле:

$$T_{[в.р.rsw0]}^2 = m T_{[в.р.rsw0]}^2 + (h c/n)^2$$

$T_{[в.р.rsw0]}$ для плоскости (10-10) и гомологичной ей (21-30) равна трансляции структуры $T_{[rsw0]}$ в этом направлении и $1/3 T_{[rsw0]}$ для плоскости (11-20) и каждой из гомологичных ей. $T_{[в.р.rsw0]}$ вычисляется из параметра a структуры в соответствии с рис. 2 по формулам:

$$\begin{aligned} T &= a: T_{[11-20]}^2 = a^2 \\ T &= a\sqrt{3}: T_{[10-10]}^2 = (a\sqrt{3})^2 \\ T &= a/3\sqrt{39}: T_{[31-40]}^2 = (a/2)^2 + (7/6 a\sqrt{3})^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T &= a\sqrt{7}: T_{[41-50]}^2 = (a/2)^2 + (3/2 a\sqrt{3})^2 \\ T &= a/3\sqrt{21}: T_{[21-30]}^2 = (a/2)^2 + (5/6 a\sqrt{3})^2 \\ T &= a/3\sqrt{57}: T_{[23-50]}^2 = a^2 + (8/6 a\sqrt{3})^2 \end{aligned}$$

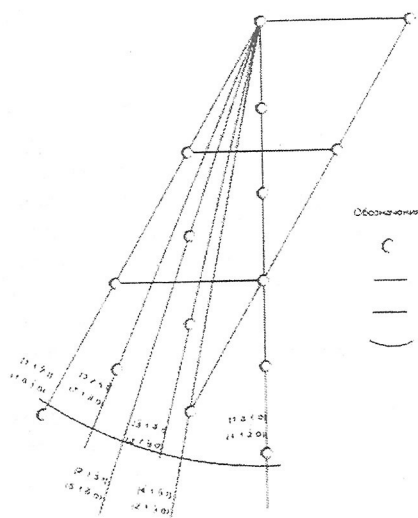


Рис. 2. Структурный план кубической ПУ в установке Браве или упаковки с любым числом слоев. 1. Следы направлений $[0001]$ ($[111]$ в кубической установке), 2. границы э.я., 3. следы плоских сеток (п.с.), в которых лежат кратчайшие расстояния между сферами и пустотами, 4. след сферы, отсекающей из начала координат расстояние $2a$ в кубической установке. Цифрами даны общие индексы символов структурных рядов в установке Браве и символы вертикальных п.с.

Пример расчета

Большая часть кристаллических структур описана в терминах классической кристаллографической теории ПУ. Применение теории в настоящее время практически умирает. Ее основа — несжимаемые равные шары-анионы, образующие ПУ, и независимые от них меньшие шарики-катионы в закрытых пустотах — противоречит фактам. Теория может быть спасена лишь в случае, если примет новый вид.

В качестве предпосылки отметим, что эффективные ионные радиусы, на которые опирается теория, дают удовлетворительные прогнозы лишь для расстояний анион-анион или анион-катион, из которых вычислены. Что касается расстояний между катионами, их прогноз не может быть удовлетворительным, потому что они находятся по отношению друг к другу во второй координационной сфере (к.с.), тогда как вычислены из первой. Систему эффективных радиусов необходимо пополнить данными о радиусах катионов, вычисленных во второй к.с., т.е. по тому же принципу, что и анионы в классической системе. Первый такой радиус (для Si) опубликован в [4] и вычислен из угла Si-O-Si и длины связи Si-O по формуле $R_{Si} = [Si-O] \cdot \sin \frac{1}{2} < [Si-O-Si]$. В соответствии со способом вычисления радиус был назван авторами "одноугольным". Как Л. Полинг в своё время объяснил наличием ван-дер-ваальсовых радиусов то, что из цепочечных органических соединений только углеводороды могут принять конформацию в виде прямой линии, так и авторы [4] объяснили невозможность образования слишком малых углов Si-O-Si наличием одноугольных радиусов у Si. Этим же объясняется невозможность соединения кремнекислородных тетраэдров в силикатах сторонами или рёбрами.

Одноугольные радиусы еще для 14 элементов, в основном анионов, приведены в [5], где отмечено, что они являются радиусами отталкивания и варьируют от соединения к соединению при смене физико-химических условий. Несмотря на это, одноугольным радиусам было придано фундаментальное значение. В частности, смена полиморфных модификаций SiO_2 от кварца к стишовиту (структурный тип рутила) объясняется тем, что под давлением одноугольные радиусы у атомов обоих элементов уменьшаются, тогда как длина связи сохраняется. Расшифровав ранее структуры некоторых оксидов 3-валентных редких земель, Хайд в цитируемой работе подчеркнул, что плотнейшую упаковку в них образуют атомы редких земель, а кислород заполняет все октаэдрические и часть тетраэдрических пустот. Таким образом, одноугольные радиусы характеризуют анионы и катионы, являясь радиусами второй к.с. в кристаллических структурах. Расшифрованных к настоящему времени кристаллических структур достаточно для того, чтобы вычислить эти радиусы практически для всех элементов Менделеевской системы.

Методы и результаты расчетов

В основу расчёта положены структурные данные бинарных соединений из американской картотеки ASTM, руководства [6] и справочника [7]. Радиусы Ac, Po и Tc вновь вычислены по [7-9]. При этом оказалось, что вновь вычисленный из нитрида радиус Tc оказался меньше оксидного (1.78). Для кристаллических структур, построенных по закону кубической ПУ, расчёты велись в соответствии с табл. 1, для структур с гексагональной ПУ и более низ-

кой симметрией – по приведенным выше формулам. Вычисления выполнены для каждого элемента из максимально возможного числа соединений (гидридов, оксидов, фторидов, нитридов, фосфидов, карбидов). Из полученных результатов выбирался минимальный. Полученные таким путём минимальные радиусы даны в табл. 3.

Таблица 3. Минимальные радиусы отталкивания и одноугольные радиусы Хайда.

I 1a 1b	II 2a 2b	III 3a 3b	IV 4a 4b	V 5a 5b	VI 6a 6b	VII 7a 7b	VIII 8a 8b			
Li 1.15	Be 1.34 1.39 ⁴	B 1.29 1.33 ⁴	C 1.25 ⁴ 2.60 ⁵	N 1.14 ⁴ 1.48 ⁵	O 1.13 ⁴ 1.36 ⁵	F 1.08 ⁴ 1.33 ⁵	Ne			
Na 1.39	Mg 1.48	Al 1.55 ¹ 1.63 ⁴	Si 1.57 1.55 ⁴	P 1.54 1.46 ⁴ 1.86 ⁵	S 1.45 ⁴ 1.86 ⁵	Cl 1.44 ⁴ 1.81 ⁵	Ar			
K 1.61	Ca 1.70 ¹	Sc 1.57 ¹	Ti 1.44	V 1.44	Cr 1.43	Mn 1.44		Fe 1.35 ²	Co 1.38	Ni 1.48 ²
Cu 1.43	Zn 1.62	Ga 1.40 1.63 ⁴	Ge 1.43 1.58 ⁴	As 1.58 ⁴ 1.91 ⁵	Se 1.58 ⁴ 1.93 ⁵	Br 1.94 1.96 ⁵	Kr			
Rb 1.68	Sr 1.82	Y 1.76	Zr 1.63	Nb 1.49	Mo 1.16	Tc 1.41		Ru 1.38	Rh 1.38 ³	Pd 1.07
Ag 1.51	Cd 1.30	In 1.68	Sn 1.58	Sb 1.97 2.08 ⁵	Te 1.80 2.11 ⁵	I 2.12 2.20 ⁵	Xe			
Cs 1.84	Ba 1.95	La 1.86	Hf 1.81	Ta 1.52	W 1.46	Re 1.55 ¹		Os 1.40	Ir 1.38 ³	Pt 1.07
Au 1.44	Hg 1.73	Tl 1.76	Pb 1.68	Bi 1.99	Po (1.99)	At	Rn			
Fr (-)	Ra (2.25)	Ac (-)								

Lantanides	Ce 1.77	Pr (-)	Nd 1.82	61(-)	Sm 1.92	Eu 1.92	Gd 1.91
------------	------------	--------	------------	-------	------------	------------	------------

Tb 1.89	Dy 1.88	Ho 1.86	Er 1.86	Tm 1.25	Yb 1.84	Lu 1.83
---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------

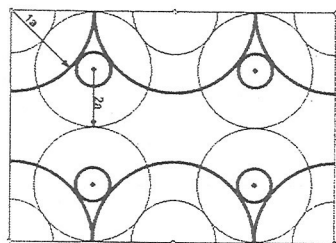
Actinides	Th 1.98	Pa 1.75	U 1.74	Np 1.73	Pu 1.73	Am 1.75	Cm (-)
-----------	---------	---------	--------	---------	---------	---------	--------

Примечания: радиусы вычислены из соединений металла: ¹ с N; ² с S; ³ с P, ⁴ по [4, 5], ⁵ по [17], числа в скобках получены из числа соединений, недостаточного для вывода о том, что он является минимальным.

Первый вариант таблицы без данных для Po и Au и недостаточными данными для Tc опубликован в [11]. Данные, полученные из оксидов и вычисленные для анионов, сносок не содержат. Для данных, полученных не из оксидов, а также для данных Хайда и анионных радиусов системы Белова-Бокия источник указан в примечаниях. Из табл. 3 видно, что для подавляющего числа металлов минимальным радиусом характеризуется оксид. Лишь у кальция, скандия и технеция он приходится на нитрид, у железа и никеля – на сульфид, у родия и иридия – на фосфид. Радиусы отталкивания анионов из [5] и системы Белова-Бокия включены, если оказались меньше наших.

CaF₂

110



TiO₂

110



Обозначения:

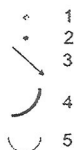
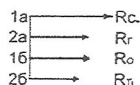


Рис 3. Соединения AX_2 структурных типов, кристаллизующихся в кубической и гексагональной упаковках. Сечения через центры анионов и катионов. 1. Центр катиона, 2. центр аниона, 3. радиус сферы и наименование атома, 4. границы сфер в классической интерпретации, 5. границы сфер упаковки, сопряжённой с классической.



Каждому радиусу отталкивания R может быть сопоставлен радиус связи r . В классической системе эф-

фективных ионных радиусов ими являются только радиусы катионов. Радиусы отталкивания R и радиусы связи r в бинарном соединении A_nX_m связаны следующим образом: $r_A = l - R_X$; $r_X = l - R_A$, где l – длина связи $A-X$. На рис. 3 на примере сечений структурных типов флюорита и рутила показано взаимоотношение больших и малых радиусов как анионов, так и катионов. Обе упаковки сопряжены через длину связи. Сферы отталкивания и связи атомов представляют собой те “взаимопроникающие сферические тела”, с помощью которых Д.Б. Титоров предлагает строить модели кристаллических структур [12].

Приложение геометрической теории бинарных упаковок М. Холлан

В 1979 г., через год после опубликования первого одноугольного радиуса, на Фёдоровской сессии в Санкт-Петербурге с докладом “Непрерывный переход

между структурными типами в свете плотнейших упаковок из сфер разного радиуса" (см. приложение) выступила венгерский геометр М. Холлаи. Ею отдельно для октаэдрических и тетраэдрических пустот были рассмотрены изменения кубической плотнейшей упаковки из сфер с радиусом в 1, когда во все пустоты помещаются малые сферы, радиусы которых изменяются от 0 до 1, а общая упаковка остаётся плотнейшей. Она показала, что в процессе роста малых сфер процент заполнения пространства возрастает до момента, когда малая сфера касается больших. В этот момент заполнение пространства максимально, координационными многогранниками являются октаэдр и тетраэдр, а соотношение радиусов соответствует правилам Магнуса-Гольдшмидта.

С дальнейшим ростом малых сфер упаковка искажается, процент заполнения пространства падает, меняется и координационный многогранник [13]. До достижения малыми сферами радиуса в 1 система проходит через меньшие, чем первый, максимумы заполнения пространства. Так, когда радиусы малых сфер, находящихся в октаэдрических пустотах, достигают размеров 0.7320 радиуса большой сферы, система приходит во второй максимум заполнения пространства, а координационным многогранником для малой сферы становится куб (структурный тип CsCl), что опубликовал Р.В. Галиулин [14]. При достижении сферой в тетраэдрической пустоте радиуса 0.1832 от радиуса большой сферы её координационный многогранник – тригональная призма. Когда радиусы сфер, находящихся в октаэдрических или тетраэдрических пустотах, достигает 1, координационным многогранником этих сфер становится кубооктаэдр. Все координационные многогранники бирадиальных упаковок входят в число 10 неклассических многогранников, описанных Н.В. Беловым в «Синей книге».

Таблица 4. Расстояния между центрами сфер и пустот в некоторых кристаллических структурах, выраженные в радиусах сфер плотнейшей упаковки.

Структурный тип	NaCl галит	CaF ₂ флюорит	ZnS		NiAs	TiO ₂ рутил
			сфалерит	вюртцит		
сфера-пустота	1.4142 ¹	1.2247 ¹	1.2247 ¹	1.2247 ¹	1.4142 ¹	1.4142 ³
две пустоты	2.000 ²	0.7071 ²	2.000 ²	2.000 ²	0.8165 ²	2.8284 ³

В табл. 4 приведено соотношение между радиусами сфер и межатомными расстояниями в некоторых структурах на базе плотнейших упаковок. Используются: ¹правила Магнуса-Гольдшмидта, ²расчеты М. Холлаи [13] и ³А. Уэлса (структурный тип рутила) [14]. К сожалению, М. Холлаи не рассмотрела бирадиальных упаковок на базе гексагональной. Но логично предположить, что

структурный тип рутила является бирадиальной плотнейшей упаковкой на базе гексагональной упаковки сфер с радиусом 1.

Расстояния сфера-сфера в данном случае всегда равны 2, т.к. все величины выражены в радиусах сферы. Расстояния сфера-пустота в табл. 4 отвечают длине связи. Различия между ними для октаэдрических (с.т. галита, арсенида никеля, рутила) и тетраэдрических (с.т. флюорита, сфалерита, вюртцита) пустот отражают то, что от длины связи (в классической теории — от радиуса катиона) зависит, октаэдрическую или тетраэдрическую пустоту займёт атом в упаковке. В случае сфалерита и вюртцита в обеих сопряженных бирадиальных упаковках меньшая сфера занимает тетраэдрическую пустоту, а обе упаковки являются плотнейшими. Об этом говорят расстояния пустота-пустота, равные 2. За единичные могут быть приняты сферы каждой системы из одноименных атомов. Т.е. упаковки “анионов” и “катионов” совершенно равноправны. В случае флюорита плотнейшей является упаковка, где единичные сферы — атомы Са. При том, что имеются сопряженные бирадиальные упаковки с заполненными октаэдрическими пустотами (галит, арсенид никеля, рутил), лишь в случае галита обе являются плотнейшими.

О чем говорят различия между расстояниями пустота-пустота в структурах остальных типов? Флюорит и рутил, являющиеся типами AX_2 , относятся к разным упаковкам. У флюорита расстояния между атомами X меньше, чем между атомами А. При малой длине связи и с малыми радиусами R_X сформирована кубическая упаковка. У рутила радиусы R_X превышают R_A и сформирована гексагональная упаковка. В случае арсенида никеля, когда, в отличие от галита, R_A и R_X различаются, тоже формируется гексагональная упаковка. Таким образом, соотношение атомных радиусов во второй координационной сфере бинарного соединения определяет, кубическая или гексагональная упаковка сформируется при его кристаллизации. В этом, видимо, причина большого числа структур сульфидов с гексагональной упаковкой. R серы (1.45) сильно превышает R кислорода (1.13). В результате металлы, в оксидах образующие кубическую упаковку с заполнением октаэдрических пустот, слишком малы по сравнению с серой. Потому в сульфидах они “стягивают” слои из атомов серы в двухслойную упаковку. Возможно, слои k или g в многослойных упаковках образуются также в зависимости от того, равны или различаются R_A и R_X .

В оксидах редких земель обнаружены атомы кислорода в октаэдрических и тетраэдрических пустотах [5]. Почему длина связи М-О оказалась различной? Известно, что у атомов редких земель в связи участвуют либо верхняя, либо третья электронные оболочки. По-видимому, в данных оксидах имеют место оба случая. В сфалерите и вюртците нет разницы между ролями цинка и серы. Почему формируется гексагональная упаковка? Можно предположить, что

атомы какой-то примеси, образующей с серой длинную связь, но имеющие небольшой радиус R , заполняют часть октаэдрических пустот и “стягивают” сферы упаковки, вынуждая атомы серы формировать слои z .

В биметаллических карбонатах, в первую очередь доломите, “атомы углерода смещены относительно плоскости, образуемой тремя атомами кислорода ... в направлении катиона с меньшим ионным радиусом” [16, с. 18]. Но эффективные радиусы катионов малы, чтобы влиять на расстояния катион–катион. В данном случае на группу CO_3 влияют радиус отталкивания углерода и разница между радиусами отталкивания Ca и Mg . Именно вследствие разницы R_{Ca} и R_{Mg} атом углерода в группе CO_3 смещается относительно плоскости из атомов кислорода.

Таким образом, фундаментальное значение радиусов, открытых Б.Д. Хайдом, подтверждается геометрической теорией М. Холлаи. Предлагается этот новый параметр назвать радиусом Хайда-Холлай или НН-радиусом. Признание НН-радиусов снимает острые противоречия в учении о плотнейших упаковках и ионных радиусах [17, 18].

Выводы

В любой кристаллической структуре на базе классической ПУ центры сфер и пустот образуют общую решётку, вследствие чего любое межатомное расстояние совпадает с рациональным направлением.

В любой кристаллической структуре на базе классической ПУ межатомные расстояния на избранном рациональном направлении легко вычисляются из параметров структуры и кратны расстояниям в соответствующей упаковке.

В бинарных соединениях A_nX_m с ненаправленными связями атомы ведут себя как сферы по отношению к одноименным атомам, радиусы отталкивания которых R_A и R_X вычисляются из второй координационной сферы, и по отношению к атомам другого наименования, радиусы которых r_A и r_X вычисляются из первой координационной сферы и представляют собой разность между длиной связи l и радиусом отталкивания противоположного атома.

Любая бинарная структура представляет собой две бирадиальных упаковки, сопряженных через длину связи, из которых хотя бы одна является плотнейшей. Структура кристалла определяется не двумя жёсткими радиусами, а тремя величинами R_A , R_X и l , из которых лишь l является постоянной в различных физико-химических условиях. Соотношение R и l определяет, какую пустоту в упаковке из атомов одного наименования займёт атом второго. Со-

отношение R_d и R_x определяет, кубическая или гексагональная упаковка (слой k или z) сформируется при кристаллизации.

Автор благодарит Е.Н. Зинченко (Воронеж) за сведения о кристаллических структурах золота, полония и технеция; Я.В. Кучеринко за ценные советы и Р. Колача за компьютерную обработку иллюстраций.

Список литературы

1. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во АН СССР, 1947. 239 с.
2. Евзикова Н.З. Принципы структурно-геометрического анализа кристаллов // Зап. ВМО. 1965. № 2. С. 129-134.
3. Михеев В.М. Новые идеи в учении о симметрии (элементы гомологичности самогомологических систем) // Кристаллография. Тр. Фёдоровской научной сессии 1949 г. М.: Металлургиздат, 1951. С. 49-108.
4. O'Keef M., Hyde B.G. On Si-O-Si configuration in silicates // Acta Cryst. 1978. B34. P 27-32.
5. Hyde B.G. Inorganic and mineral structures reconsidered // J. Proc. R. Soc. of New South Wales. 1986. V 19, N 3-4. P 153-164.
6. Бокий Г.Б. Введение в кристаллохимию. М.: Изд-во МГУ, 1954. 491 с.
7. Михеев В.М. Рентгенометрический определитель минералов. М.: Госгеолтехиздат, 1957. 868 с.
8. Jones P.J., Rumpel H., Schwarzmann E., Sheldrick G.M. Gold (III) oxide // Acta Cryst. 1979. B35. P 1435-1437.
9. Bagnall K.W., Eye W.M. The preparation of polonium metal and polonium dioxide // J. Chem. Soc. 1954. P 4295-4299.
10. Виноградов И.В. Нитриды технеция // Журнал неорг. хим. 1978. Т. 23, № 5. С. 1158-1160.
11. Раменская М.Е. О понятии "Сферы отталкивания одноимённых ионов в кристаллах" // Спектроскопия, кристаллохимия и реальная структура минералов и их аналогов. Казань: Изд-во КазГУ, 1990. С.153-171.
12. Титоров Д.Б. Формирование плоских и пространственных структур из сферических тел с взаимопроникающими оболочками // Кристаллография. 2001. Т. 46, № 1. С. 25.
13. Hollai M. Das Dichteste Gitterförmisch p-system der Kugeln // Ann. Univ. Sci. Budapest. Sect. Math. 1981. B24. S 157-160.
14. Галиулин Р.В. Кристаллографическая геометрия. М.: Наука, 1984. 160 с.
15. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т. 1. М.: Мир, 1987. 250 с.
16. Карбонаты. Минералогия и химия. М.: Мир, 1987. 494 с.
17. Лебедев В.И. О необходимости создания новой кристаллохимии на основе системы ионно-атомных радиусов и современных представлений о природе химических связей // Зап. ВМО. 1985. № 6. С. 649-663.
18. Белов Н.В., Бокий Г.Б., Франк-Каменецкий В.А., Урусов В.С. Что нового в так называемой "новой кристаллохимии"? // Известия АН СССР. Сер. геол. 1977. № 3. С. 136-146.

Приложение

НЕПРЕРЫВНЫЙ ПЕРЕХОД МЕЖДУ СТРУКТУРНЫМИ ТИПАМИ В СВЕТЕ ПЛОТНЕЙШИХ УПАКОВОК ИЗ СФЕР РАЗНОГО РАДИУСА

М. Холлаи

На моих докладах, читанных в Математическом институте АН СССР им. В.А. Стеклова, присутствовал Р.В. Галиулин, старший научный сотрудник Института кристаллографии АН СССР им. В.А. Шубникова. Я благодарна ему за то, что могу присутствовать на вашей сессии, а также за помощь, которую он оказал мне в выборе кристаллографических терминов, с которыми я мало знакома.

Рассмотрим плотнейшую решетчатую упаковку единичных шаров. Это гранецентрированная кубическая решетка структурного типа $Cu - Fm\bar{3}m$. Доказано только то, что эта упаковка – плотнейшая, если центры шаров составляют решетку. Положим в октаэдрическую пустоту маленький шарик радиуса ρ . Тогда мы говорим о бирешетчатой упаковке шаров разного радиуса, а в кристаллографии – о типах АБ, например, $NaCl$ (рис. 1). Я нашла плотнейшую бирешетчатую упаковку кругов на плоскости и шаров в пространстве, если ρ растёт от 0 до 1. Эту геометрическую проблему предложил Дж. Хорват – мой руководитель по аспирантуре.

Если $\rho < \sqrt{2} - 1 = 0.4142\dots$, то плотность упаковки растёт и группа симметрии $Fm\bar{3}m$ сохраняется (рис. 2). Но что случится, если шарик не вмещается в октаэдрическую пустоту? Как раздвигаются единичные шары при условии, что упаковка, составленная из них и вложенных шаров – плотнейшая? Интуитивно думают, что раздвижение равномерно, но с помощью геометрических методов я доказала, что в пространстве решетка становится ромбоэдрической. Поворотная симметрия 3-го порядка и группа симметрии $R-3m$ сохраняются, но углы раскрываются от 60° до 90° , а потому расстояние между слоями уменьшается. Если $\rho = \sqrt{3} - 1 = 0.7320\dots$, то упаковка подойдет к структурному типу $CsCl$, т.е. к примитивной кубической решетке $Pm\bar{3}m$. Увеличиваем дальше радиус ρ . Если мы хотим, чтобы плотность была максимальной, то раздвижение тоже будет неравномерное. В пространстве (решетка) растягивается по оси 4-го порядка и группа симметрии такой решетки $P^4_{21}m$, т.е. получается структурный тип $CuAu$. Когда $\rho = 1$, снова получается тип Cu , плотнейшая упаковка $Fm\bar{3}m$.

Рассмотрим случай, когда в плотнейшую решетчатую упаковку шары помещаются в тетраэдры – тип CaF_2 . Если $\rho < \sqrt{(3/2)} - 1 < \rho < \sqrt{(5/3)} - 1$, а упаковка

– плотнейшая, то одна сторона тетраэдра больше двух (остальных) и с возрастанием ρ двугранный угол тетраэдра растет до тех пор, пока не достигнет 90° . Если $\sqrt{(5/3)} - 1 < \rho < \sqrt{(7/3)} - 1$, начнет расти соседняя сторона тетраэдра до тех пор, пока второй угол не достигнет 90° . В этом случае основной параллелепипед решетки – прямая призма.

Если $\sqrt{(7/3)} - 1 < \rho < 1/\sqrt{3}$, высота призмы растет. Когда $\rho = 1/\sqrt{3}$, шары радиусов ρ касаются. Поэтому, если ρ растет, то сторона правильного треугольника будет больше двух, а высота призмы уменьшается до двух, когда $\rho = 2/3$. Если ρ растет дальше, высота призмы остается равной 2, но единичные шары не касаются шаров радиуса ρ . Когда $\rho = 1$, расстояние между центрами разного типа равно 2 – возвращаемся к упаковке типа Cu.

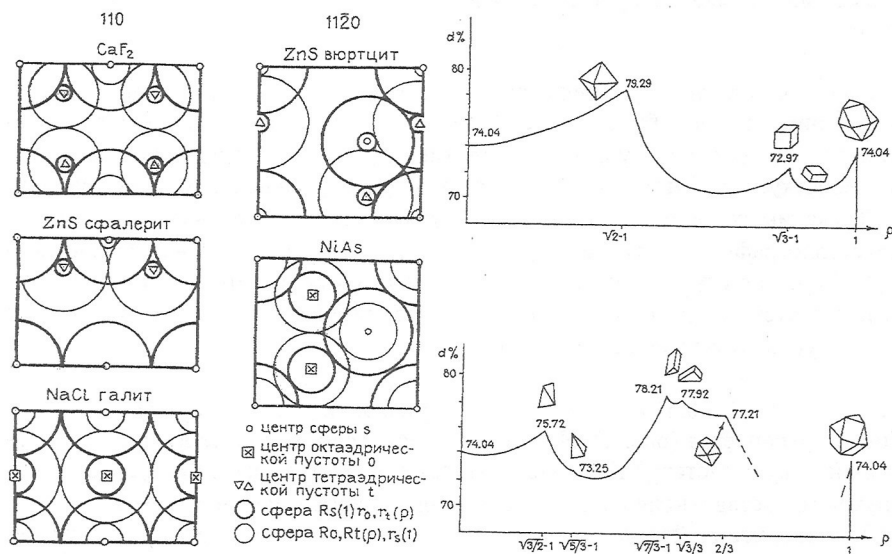


Рис. 1 (слева). К постановке задачи. Пояснения в тексте.

Рис. 2 (справа). Изменение плотности упаковки с ростом “маленького шарика”.

К ВОПРОСУ О ВАЛЕНТНОСТИ И СВЯЗНОСТИ

Н.Л. Смирнова. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

На Европейском кристаллографическом совещании в различных докладах применялись понятия топология (topology) [5, с. 60, 204, 240], топологический аспект структуры (topological aspect of structure) [5, с. 58, 168], топологические методы (topological methods) [5, р. 228], топологические свойства распределения заряда (topological properties of charge distribution) [5, с. 42, 43] топологическое сходство (topological resemblance) [5, с. 57] и др. Авторы давали определения терминов “топология” и “топологический” по-разному. Термины – это скелет любой науки. Поэтому обсуждение, соотнесение, уточнение терминов для более или менее однозначного их понимания всегда полезно. Рассмотрим понятия “связность” и “валентность”. Связность – понятие, используемое в теории графов, означает число ребер, выходящих из одного узла или вершины. Связность – это топологическое свойство. Поэтому любая наука, в частности кристаллология, изучающая координацию, изучает топологические свойства или топологию.

Координация элементов – свойство универсальное и имеет место в любой системе. Например, Солнце координирует планеты, атом координирует вокруг себя идентичные или разные атомы. Координационная сфера – совокупность элементов-лигандов, примыкающих к центральному элементу. В плоских или закрытых мозаиках можно говорить о координации ребер, граней относительно вершин (короны вершин V_p , V_g), относительно граней (короны граней). Корона граней может быть полной, если учитываются грани, примыкающие к ней по вершинам и ребрам, и простой, если учитываются грани, примыкающие только по ребрам (корона G_p , G_g). Отметим, что закрытые мозаики – это полиэдры, в т.ч. внешние формы кристаллов. Корона вершины характеризуется последовательностью примыкающих к ней граней, например, 33434 (3 – треугольник или 3-гон, 4 – четырехугольник или 4-гон). Эта последовательность (формула Шлефли) может быть записана в сокращенном виде 3_2434 или $|3434|<2/1/1/1>$ или $|3434|<2111>$. В обобщенном буквенном виде последовательность записывается $|abab|<2111>$. В прямых скобках приводятся качественно разные n -гоны, в уголках – их коэффициенты, т.е. числа идентичных n -гонов. Состав последовательности характеризуется общей или качественно-количественной формулами, 3_24_2 , $|34|<3/2>$, где $|34|$ – качественная формула, состоящая из разных элементов, $3/2$ – количественная, состоящая из отношений коэффициентов, указывающих на содержание элементов в формуле. Общее число граней, примыкающих к вершине, называется общей валентностью $ОВ_v$ ($TV_v 5=3+2$). Число разных n -гонов, примыкающих к вершине называется разной валентностью $РВ_v$ ($DV_v 2$, а именно 3-гон и 4-гон), количественный состав всех n -гонов называется дифференцированной

формулой РИВ ($\text{DIV} \vee 3/2$). Корона Гг характеризуется, как и корона Вг, последовательностью примыкающих граней, составом и соответствующими им формулами.

Мозаики представляют собой одновременно графы плоские или закрытые. Вершины графов характеризуются связностью. Вершины мозаик – узлы графов, общая валентность – связность вершин графов плоских или закрытых. В [1] дано 29 топологических моделей кластеров со связностью 0, 1, 2, 3, 4. Нами модели разделены на четыре группы: без ядра и с ядром из 3-гона, 4-гона, 5-гона (рис. 1). Пространственным моделям в [1] поставлены в соответствие количественные формулы из связностей от большей к меньшей. Нами эти формулы представлены в виде качественно-количественных формул в порядке увеличения арности формулы. Разных качественных формул 15, количественных 27: $|0|<1>$, $|1|<2>$, $|2|<3, 4, 5>$, $|3|<4>$, $|4|<->$, $|12|<2/1, 2/2, 2/3>$, $|13|<3/1>$, $|14|<4/1>$, $|23|<1/4, 2/2, 3/2 \text{ (2 раза)}>$, $|24|<4/1>$, $|34|<4/1, 2/3>$, $|123|<1/2/1, 3/1/1, 1/3/1 \text{ (2)}>$, $|1/1/3, 2/1/2>$, $|124|<2/2/1>$, $|134|<1/3/1>$, $|234|<1/2/2, 2/2/1>$, $|1234|<1/2/1/1>$.

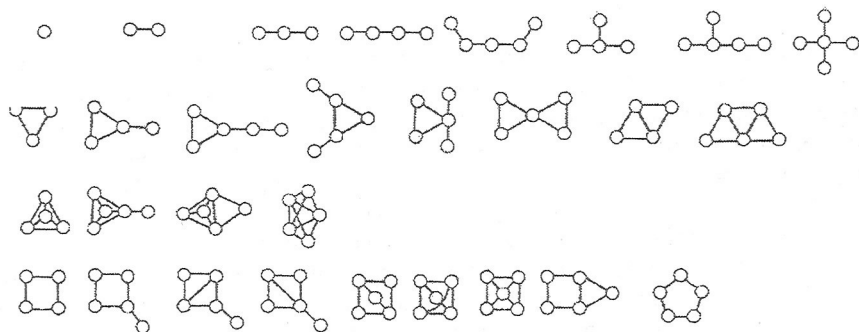


Рис. 1. Топологические модели связности: точечные, с 3-угольным, 4-угольным и 5-угольным ядрами.

Набор качественных формул соответствует почти полному набору флага $[1234]$, за исключением формулы 4. Это еще один пример теоретической реализации закона малых целых чисел (ЗМЧ). Составляем линейную компликационную схему (ЛКС) для количественных формул. На втором ее месте стоит наибольшее число, на первом – предпоследнее по величине число, затем числа следуют от меньшего к большему, например, 45123. Базисные бинарные формулы из взаимно простых чисел и единица выделены полужирно, латентные, неявные формулы взяты в кавычки. Все формулы входят в 4 первых ряда плоской компликационной схемы (ПКС) Вейсса-Брокоччи-Гольдшмидта-Фарея-Смирновой: “1/1”, 2/2, 2/2/1, 2/3, 2/3/1, 1/2, 1/2/1, 1/2/1/1, 1/3, 1/3/1, 1/4, “1”, 2, 3, 4, 5. В [6] приведены все возможные кластеры из 6-гонов (п-гексы с

арностью, т.е. числом 6-гонов $n = 1-5$). Нами n -гексы разделены на 4 группы – безъядерную и с ядрами (рис. 2).

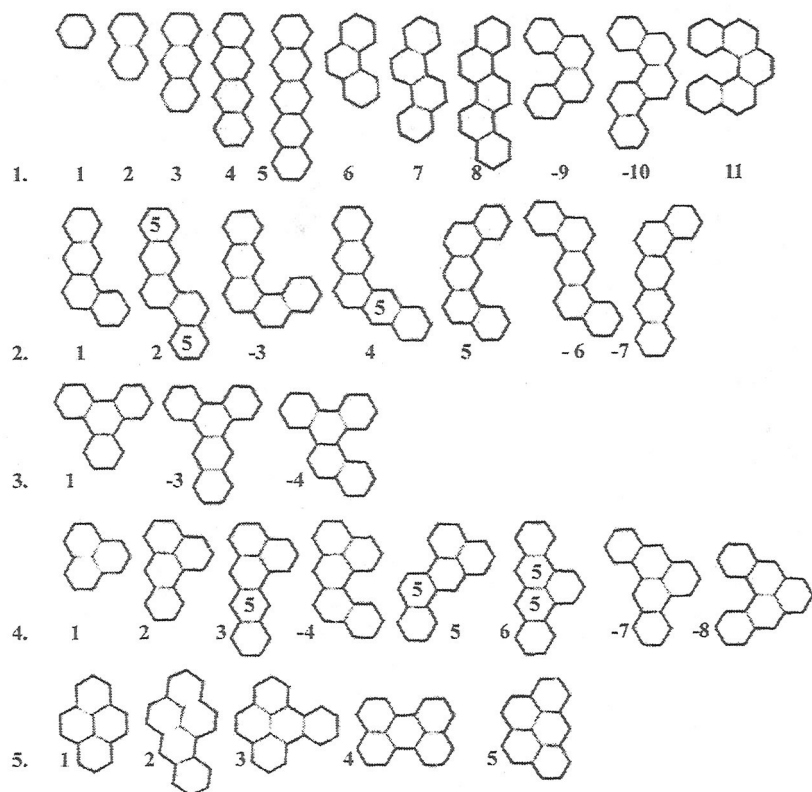


Рис. 2. Линейные и центральные n -гексы.

Безъядерные или линейные n -гексы приведены на рис. 2 в первой и второй строках. В первой находятся прямые (П или S) и волнистые (В или W) n -гексы. Во второй приведены смешанные (ПВ или SW) n -гексы. В остальных строках находятся центральные n -гексы с ядрами: Н-гексагон (рис. 2.3.1), Т (3—листник, по Н.В. Белову), рис. 2.4.1, Ч (4-листник), рис. 2.5.1, П (5-листник), 2.5.4. Производные n -гексы от ядерных архетипов возникают в результате действия конструктивных законов: упорядоченного замещения, внедрения-вычитания, деформации с образованием последовательностей. Так, n -гексы 2.1.2-2.1.5 образуют политипный ряд. Производные n -гексы от Т, Ч, П образуются в результате замещения одного, двух гексагонов ядер на два, три, причем небольшим числом возможных способов. Большинство n -гексов реализуется в органических молекулах полностью или в виде фрагментов (поли-

циклы, ПЦ). Некоторые п-гексы реализованы только при замене 6-гона на другие п-гоны, например, 5-гоны. На рис. 2 такие 6-гоны обозначены цифрой 5. Некоторые п-гексы совсем не реализованы и обозначены знаком минус. Все п-гексы характеризуются составом $|6| < 1, 2, 3, 4, 5 >$. Вершины п-гексов характеризуются валентностью (Вг) и связностью. В кластерах валентность Вг вершины и связность могут быть разными. Но связность и валентность 6-гонов (Гг) идентичны. Нами составлены 34 качественно-количественные формулы общих валентностей Гг и связностей п-гексов. Разных качественных формул всего 10, количественных 16: $|0| < 1 >$, $|1| < 2 >$, $|2| < 3 >$, $|12| < 2/1 (2), 2/2 (4), 2/3 (10) >$, $|13| < 3/1 >$, $|23| < 2/2 >$, $|24| < 4/1 >$, $|123| < 1/2/1, 3/1/1 (2), 1/3/1 (3), 1/1/3, 2/1/2 (3) >$, $|234| < 2/2/1 >$, $|1234| < 1/2/1/1 >$. Приводим ЛКС формул количественных составов: "1/1", 2/2, 2/2/1, 2/3, 1/2, 1/2/1, 1/2/1/1, 1/3, 1/3/1, 1/4, 0, 1, 2, 3. Ранее [3, 4] нами выделены 139 ПЦ, причем 83 из них линейные и 56 центральные. Из [2] и [5] к ним добавлены 36 новых ПЦ, причем 18 из них линейные и 18 центральные (рис. 3). Новые линейные и центральные ПЦ прекрасно дополняют систему линейных [3] и центральных [4] ПЦ.

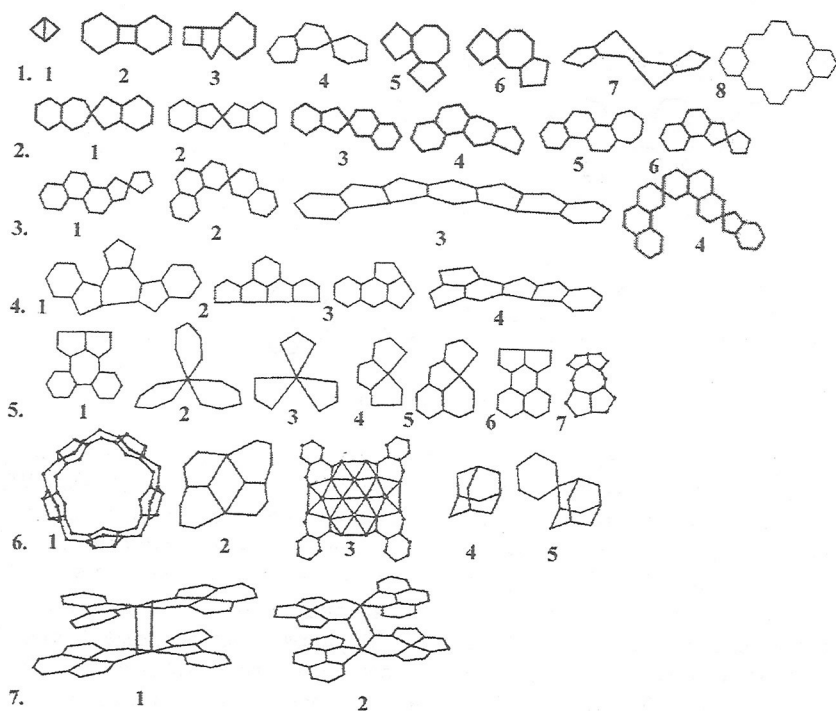


Рис. 3. Новые 36 ПЦ, из них 18 линейных (ряд 1-3) и 18 центральных.

Но среди центральных ПЦ появились принципиально новые с сочленением циклов в одной вершине (3.5.2, 3.5.3). Добавились объемные ПЦ (3.6.4). Этот ПЦ латентно присутствует в алмазе и адамантине. ПЦ 3.6.1 состоит из 5 фрагментов 3.5.7, образующих объемный ПЦ. Сам фрагмент 3.5.7 не что иное, как сверхструктура к п-гексу 2.5.4. ПЦ 3.6.3 содержит модуль Ч (п-гекс 2.5.1), в котором два 6-гона замещены на 5-гоны, причем 5-гоны и 6-гоны центрированы с разбиением на 3-гоны. Кроме того, к 6-гонам присоединяются по два 3-гона, дополняя их до 8-гонов. ПЦ 3.7.1 и 3.7.2 составлены из трех разных модулей, а именно квадрата, линейного ПЦ 656 (сверхструктура к п-гексу 2.1.6), сверхструктуры к Ч с замещением одного 6-гона на 5-гон и сверхструктур к уже установленным ПЦ [3, 4] из 6-гонов с замещением двух или трех 6-гонов на 5-гоны. Соблюдение установленных принципов усложнения ПЦ можно ожидать и в дальнейшем.

Определены валентности Ггп полных корон циклов, входящих в 175 ПЦ, из них 101 линейный и 74 центральный. Общей валентности цикла соответствует его связность. Совокупность общих валентностей циклов одного ПЦ представляет собой совокупность связностей циклов ПЦ. Нами установлены качественно-количественные формулы общих валентностей и связностей ПЦ. Всего получено разных качественных формул 22, из них 3 линейных и 19 центральных ПЦ. Разных количественных формул 49, причем 9 линейных и 40 центральных ПЦ. В круглых скобках дано число ПЦ с идентичной формулой валентности-связности (центральные ПЦ обозначены буквой с): $|0|<1>$ (6), $|1|<2>$ (19), $|2|<с3>$ (6), $|3|<с4>$ (2), $|4|<->$, $|12|<2/1>$ (31), $2/2$ (22), $2/3$ (13), $2/4$ (3), $2/5$ (4), $2/6$, $2/7$ (2), $|13|<с3/1>$ (5), $|14|<с4/1>$, $|23|<с2/2>$ (4), $|24|<с4/1>$ (3), $|34|<с4/1, с10/5>$, $|123|<с1/2/1>$ (7), $с3/1/1$, $с1/3/1$ (5), $с1/1/3$ (5), $с1/4/1$, $с2/2/1$, $с2/1/2$ (2), $с2/2/2$, $с2/2/4$ (2), $с1/2/3$, $с3/2/1$, $с3/3/1$, $|124|<с2/2/1, с2/2/2, с4/2/4, с4/2/6>$ (2), $|134|<с1/2/2, с2/4/2, с2/6/1>$, $|234|<с2/2/1, с2/4/1>$, $|1234|<с1/2/1/1, с2/2/2/1>$, $|25|<с4/4>$ (2), $|135|<с4/4/4>$, $|235|<с2/3/1, с4/1/4>$, $|245|<с4/2/2>$, $|2345|<с6/6/1/2>$, $|12345|<с1/2/2/1/1, с4/2/4/3/2>$, $|36|<с6/1>$.

Набор качественных формул соответствует почти полному набору флага [1234] за исключением отсутствующей формулы 4. Таким образом, это еще один пример теоретической реализации закона малых целых чисел (ЗМЧ). Однако, появились новые формулы, содержащие общую валентность 5. Все эти формулы соответствуют либо новым политипам ПЦ, либо усложненным кластерам, состоящим из нескольких более простых ПЦ. Если рассматривать простые ПЦ как единое целое, то формулы упрощаются, и связность 5 исчезает. Нами составлена линейная компликационная схема (ЛКС) для 22 разных качественных формул ПЦ. "45", 452, 4523, 45123, 34, 341, 3412, 342, 23, 231, "35", 351, 352, 12, 24, 241, 36, 25, 13, 14, 0, 1, 2, 3. Составлена также ЛКС для 36 разных количественных формул связностей ПЦ: $1/1$, $2/2$, $2/2/1$, $2/2/1/1/1$, $2/2/1/2$, $2/2/2$, $3/3/1$, $4/4$, $4/4/1$, $4/4/2$, $4/4/2/2/3$, $4/4/4$, $6/6/1/2$, $2/3$, $2/3/1$, $4/6/2$,

1/2, 1/2/1, 1/2/1/1, 2/4, 2/4/1, 2/4/2, 5/10, 2/5, 1/3, 1/3/1, 2/6, 2/6/1, 2/7, 1/4, 1/4/1, 1/6, 1, 2, 3, 4.

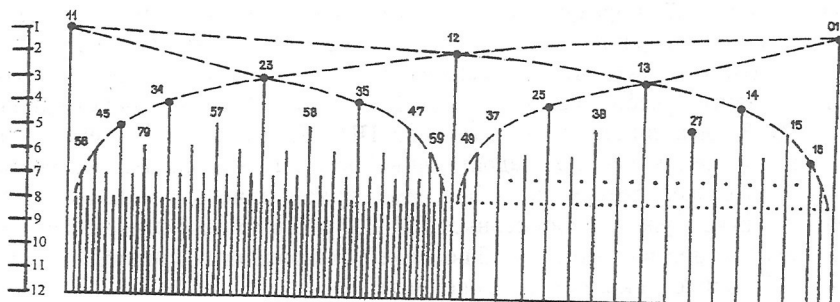


Рис. 4. ПКС базисных отношений из ЛКС.

На ПКС (рис. 4) указаны базисные формулы из всех приведенных ЛКС. Реализованы все возможные, по В. Гольдшмидту, 4 ряда. Реализованы несколько дополнительных формул в других рядах. Наиболее длинные последовательности 11 (01), 12, 13, 14, "15", 16 и 01 (11), 12, 23, 34, 45. Эти данные еще раз подтверждают справедливость ЗМЧ. Рассмотрим изменение встречаемости числа объектов системы в зависимости от их арности (табл.).

Таблица. Встречаемость моделей связностей, п-гексов и полициклов.

Арность	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	15	17	Σ
Связность	1	1	2	6	19									29
п-гексы	1	1	3	7	22									34
ПЦ лпс	6	18	14	4	1	1	1	1	1					46
ПЦ лпн	0	1	3	2	0	0	0	0	0					6
ПЦ лпсн	6	19	17	6	1	1	1	1	1					52
ПЦ лвкс			10	12	10	2	2	0	1					37
ПЦ лвкн			4	4	2	0	1	1	0					12
ПЦ лвксн			14	16	12	2	3	1	1					49
ПЦ Σл	6	19	31	22	13	3	4	1	2					101
ПЦ цс			3	15	16	5	5	6	2	1	3	0	0	56
ПЦ цн			3	3	6	2	0	0	0	0	1	2	1	18
ПЦ Σц			6	18	22	7	5	6	2	1	4	2	1	74
ПЦ Σлц	6	19	37	40	35	10	9	7	4	1	4	2	1	175
ΣΣ	8	21	42	53	76									238

Обозначения: л – линейные, п – прямые, в – волнистые, к – комбинированные (пв); с – старые данные, н – новые данные, ц – центральные, Σ – сумма, ΣΣ – сумма встречаемости связностей, п-гексов и Σлс.

Под арностью формул мы понимаем число их составляющих – точек в модели связности: гексагонов в n -гексах, циклов в полициклах. Изменения встречаемости хорошо прослеживаются в таблице. При изменении арности от 4 к 5 происходит резкое увеличение математических вариантов моделей связностей, n -гексов, тогда как число ПЦ уменьшается. При арности 9-17 число ПЦ колеблется от 0 до 4. Новые представители чаще появляются при арности 1-5 и 3-7. Об изменении частоты встречаемости сложных ПЦ с высокой арностью трудно судить, т.к. изменения происходят в пределах погрешности.

Итак, нами рассмотрена общая валентность корон n -гонов. Получены качественно-количественные формулы совокупностей валентностей. Эти формулы одновременно являются формулами связности. Составлены ЛКС и ПКС для качественных и количественных составляющих формул. Прослежена зависимость встречаемости полициклов от числа входящих в них циклов. Новые полициклы закономерно входят в систему полициклов.

Список литературы

1. Илюшин Г.Д., Демьянец Л.Н. Модель матричной сборки кристаллических структур // Проблемы современной кристаллографии. Физика кристаллизации. М.: Физматлит, 2002. С. 82-169.
2. IV Нац. Кристаллохим. конф. Черноголовка: Изд-во ООО "МАКС Пресс", 2006. 347 с.
3. Смирнова Н.Л. Упорядоченная комбинаторика в природе // Теория, история, философия и практика минералогии. Матер. докл. IV Межд. минерал. семинара. Сыктывкар: Изд-во Коми НЦ УрО РАН, 2006. С. 309-311.
4. Смирнова Н.Л. О сходстве плоских и полиэдрических мозаик // Минералогия во всем пространстве сего слова. Тр. III Ферсмановской научн. сессии. Апатиты: Изд-во К & М, 2006. С. 89-92.
5. 23rd Europ. Cryst. Meeting // Acta Cryst. 2006. A62. P 328.
6. Grunbaum B., Shephard G.C. Tilings and Patterns. London: Freeman & Co, 1987. 700 p.

ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ВЫПУКЛЫХ ПРОСТЫХ 12- ... 25-ЭДРОВ БЕЗ 3- И 4-УГОЛЬНЫХ ГРАНЕЙ

Т.Д. Сотникова

Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета, Апатиты

Полиэдрические формы широко распространены в природе. Общеизвестным примером является царство кристаллов. В живой природе полиэдры проявляются, в основном, на сферических объектах, например, кремниевых скелетах радиолярий, колониях зеленых водорослей, пыльце некоторых растений (рис. 1). Характерной структурной особенностью “живых” полиэдрических форм является отсутствие 3- и 4-угольных граней. Впрочем, для кристаллов минералов это тоже не исключение; примером могут служить додекаэдрические кристаллы пирита (рис. 1). Для описания таких объектов целесообразно использовать все возможные n -эдры без 3- и 4-угольных граней в приемлемом диапазоне n .

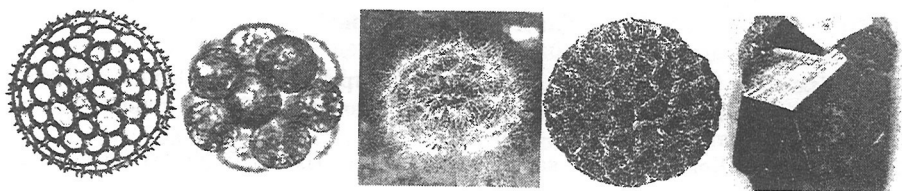


Рис. 1. Полиэдрические формы в природе: кремниевый скелет радиолярии, колония зеленой водоросли, соцветие одуванчика, цветочная пыльца, додекаэдр пирита.

Перечисление полного многообразия выпуклых полиэдров без 3- и 4-угольных граней необходимо для оптимизирования алгоритма Е.С. Федорова [1]. В нем используются три основных операции α , β и γ для получения простых полиэдров, а также операция ω редукции ребра для получения непростых полиэдров. Операция α добавляет полиэдру новую 3-угольную, β – 4-угольную и γ – 5-угольную грани. Увеличивая таким способом число граней, теоретически можно получить все многообразие простых полиэдров (на практике это число ограничено вычислительными возможностями и сегодня равно 16). Как следует из уравнения Эбергардта (см. далее), на простом n -эдре всегда присутствует хотя бы одна 3-, 4- или 5-угольная грань, т.е. он может быть получен из простого $(n-1)$ -эдра одной из операций α , β или γ .

Частота применения операций неодинакова в силу того, что основная часть простых n -эдров при любом n имеет 3-угольные грани. Для их получения из простых $(n-1)$ -эдров достаточно операции α . Среди оставшихся простых n -эдров, не содержащих 3-угольных граней, большая часть имеет 4-угольники.

Для их получения уже необходима операция β . Лишь ничтожная часть всех простых полиэдров не имеет ни 3-, ни 4-угольных граней – на них присутствуют только грани с 5 и более сторонами. Такие полиэдры получаются с помощью операции γ . Очевидно, что поиск всех простых полиэдров, не содержащих 3- и 4-угольных граней (далее γ -эдры), позволяет убрать из алгоритма операцию γ и, таким образом, ускорить получение всех простых полиэдров. Ю.Л. Войтеховским [2] пересчитаны все γ -эдры с числом граней от минимального 12 до 20. Пересчет велся вручную и был технически очень трудоемким. Есть необходимость автоматизации получения γ -эдров для проверки предыдущих результатов и расширения диапазона γ -эдров.

При выборе алгоритма генерирования стоит рассмотреть место γ -эдров среди других полиэдров и уже известные алгоритмы их генерирования. Соотношение некоторых множеств полиэдров показано на рис. 2. Как видно, γ -эдры занимают промежуточное место, являясь подмножеством простых полиэдров и надмножеством для фуллеренов – простых полиэдров, составленных только из 5- и 6-угольных граней. Простые полиэдры и фуллерены генерируются принципиально различными алгоритмами. Первый из них, федоровский, был рассмотрен выше. Второй, разработанный Д.Г. Степенщиковым, основан на идее последовательной пристыковки пента- и гексагонов друг к другу до образования замкнутой конструкции [3]. Его достоинством является возможность получения полиэдров с заведомо определенным набором граней. Федоровский алгоритм, напротив, каждый раз требует полного множества простых $(n-1)$ -эдров для получения всех простых n -эдров. Его непригодность для генерирования γ -эдров очевидна. Алгоритм Д.Г. Степенщикова использован в данной работе после модифицирования, расширяющего разнообразие допустимых граней 7- ... m -угольниками.

Триангуляция сферы с последующим дуальным переходом или алгоритм Федорова с дополнительной операцией – редукцией ребра



Рис. 2. Соотношение различных классов полиэдров и алгоритмы их генерирования.

Основной характеристикой, используемой в алгоритме, является *гранный символ* – запись вида $[f_3, f_4, f_5, f_6, \dots]$, где f_i – число i -угольных граней. Сумма всех f_i равна общему числу граней полиэдра. При определении гранных символов простых полиэдров используем формулу Эбергардта. По теореме Эйлера:

$$V + F = E + 2$$

где V – число вершин, F – число граней, E – число ребер многогранника. Для простых многогранников

$$2E = 3V$$

Из этих соотношений получаем:

$$3F = E + 6$$

Используя составляющие гранного символа f_i , можно написать:

$$F = f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + \dots, \quad 2E = 3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 + \dots$$

Последнее равенство следует из того, что каждое ребро, общее для двух граней, сосчитано дважды. Подставляем F и E в третье уравнение:

$$6(f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + \dots) = 12 + 3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 + \dots$$

после упрощений:

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + \dots$$

Это и есть уравнение Эбергардта. Из него следует, что невозможен выпуклый простой полиэдр без 3-, 4- и 5-угольных граней одновременно. В формуле отсутствует f_6 . Это позволяет объединить все полиэдры, отличающиеся только числом 6-угольных граней. Мы решаем диофантово уравнение Эбергардта при $f_3 = f_4 = 0$.

$$f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + \dots + (n-6) f_n$$

Поиск гранных символов для 12 ... 20-эдров осуществлен Ю.Л. Войтеховским. Их число составило несколько десятков. Число гранных символов для полиэдров с большим числом граней растет стремительно. Подобные комбинаторные задачи естественно решать с помощью компьютера. Специально разработанной программой авторами получены все решения уравнения Эбергарда для $n = 12 \dots 50$ (табл. 1). Но не все они реализуются в полиэдрах. На этапе генерирования γ -эдров по известному (или предполагаемому) гранному символу выяснилось, что число реализуемых гранных символов приблизительно в два раза меньше. В табл. 2 даны числа реализуемых гранных символов γ -эдров с 12 ... 25 гранями. Числа самих полиэдров, полученных в ходе

генерирования, даны в табл. 3. Как и в случае решений уравнения Эбергардта, число γ -эдров с увеличением числа граней растет по экспоненте, и уже для 25-эдров достигает десятков тысяч. Соответственно, растет и время генерирования.

Таблица 1. Число решений уравнения Эбергардта для γ -эдров с 12 ... 50 гранями.

F	N	F	N	F	N	F	N	F	N	F	N
12	1	19	15	26	135	33	792	40	3718	47	14883
13	1	20	22	27	176	34	1002	41	4565	48	17977
14	2	21	30	28	231	35	1255	42	5604	49	21637
15	3	22	42	29	297	36	1575	43	6842	50	26015
16	5	23	56	30	385	37	1958	44	8349		
17	7	24	77	31	490	38	2436	45	10143		
18	11	25	101	32	627	39	3010	46	12310		

Таблица 2. Числа реализуемых гранных символов γ -эдров с 12 ... 25 гранями.

F	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
N	1	0	1	1	2	2	4	7	9	15	19	29	44	63

Таблица 3. Числа γ -эдров с 12-...25 гранями.

F	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
N	1	0	1	1	3	4	12	23	73	192	651	2067	7290	25380

Интересное наблюдение следует из рис. 3. Если разбить все γ -эдры с определенным числом граней на группы, в каждой из которых полиэдры имеют равное число 5-угольных граней, то числа полиэдров в группах подчиняются определенной закономерности. С увеличением числа 5-угольных граней число самих полиэдров растет, достигая максимума, а затем падает. С ростом n функциональная зависимость проявляется все лучше.

По результатам работы можно сделать следующие выводы. Число гранных символов и γ -эдров растет с n "по экспоненте". Значительная часть решений уравнения Эбергардта не реализуется в полиэдрах. Поэтому важно аналитически выяснить, реализуем данный гранный символ или нет. На сегодня эта задача не решена. Проблема перечисления комбинаторных типов выпуклых полиэдров вообще и с теми или иными ограничениями, в частности, трудно формализуема и, скорее всего, неразрешима в аналитическом виде. Кроме давно полученных фундаментальных уравнений (Эйлера, Эбергардта), новых

соотношений установить не удастся. Большинство нетривиальных теорем и утверждений (о невозможности выпуклого полиэдра с 7 ребрами, невозможности γ -эдра с 13 гранями, и т.д.) доказывается перебором вариантов, что указывает на магистральный путь решения подобных задач – компьютерные вычисления. Но и здесь нельзя обойтись без предварительной аналитической работы, чтобы сократить заведомо невозможные варианты. Задача, которая стоит перед авторами – генерирование по гранным символам γ -эдров с числом граней вплоть до 50.

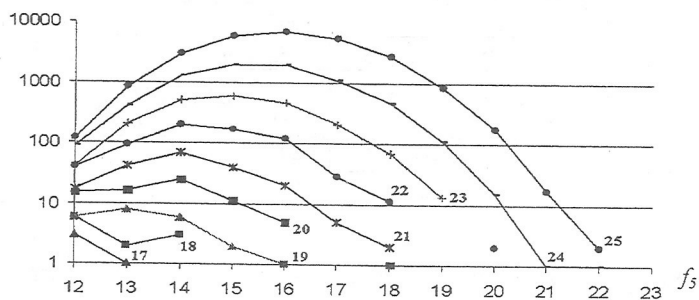


Рис. 3. Числа γ -эдров с 17 ... 25 гранями в зависимости от числа 5-угольников.

Список литературы

1. Фёдоров Е.С. Основания морфологии и систематики многогранников // Зап. Импер. СПб минерал. об-ва. 1893. Ч. 30. С. 241-341.
2. Войтеховский Ю.Л. Перечисление полиэдрических кластеров. Оптимизация федоровского алгоритма // Матер. Межд. минерал. семинара "Некристаллическое состояние твердого минерального вещества". Сыктывкар: Изд-во "Гео-принт", 2001. С. 28-30.
3. Степенщиков Д.Г. Особенности компьютерного генерирования фуллеренов // Тр. Всерос. научн. школы "Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии". Апатиты: Изд-во "К & М", 2005. С. 63-74.

О МОРФОЛОГИИ ГИПЕРФУЛЛЕРЕНОВ

Д.Г. Степенщиков. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

Гиперфуллереном называется фуллерен с большим, порядка нескольких сотен, числом атомов. Сами фуллерены в узком смысле – сферические молекулы, образованные деформированным слоем графитовой сетки. На примере гиперфуллеренов с икосаэдрической симметрией Г. Крото [1] показано их стремление к полиэдрической форме в результате уплощения поверхности гексагональной сетки между равномерно расположенными 5-членными циклами (рис. 1).

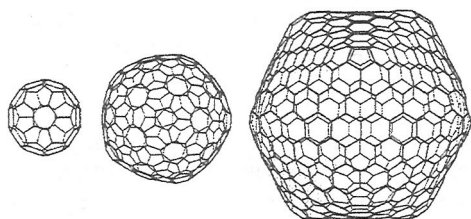


Рис. 1. От фуллерена к гиперфуллеру: C_{60} , C_{240} , C_{540} .

Подобное явление замечено С. Ииджимой при исследовании онионподобных, т.е. многослойных фуллеренов. На электронно-

микроскопических изображениях молекул видна многоугольность их поперечных сечений, что является следствием многогранности (рис. 2).

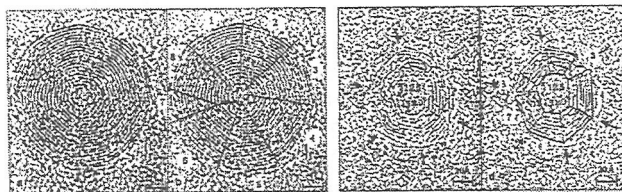


Рис. 2. Полиэдрические многослойные фуллерены.

Плоскогранность гиперфуллеренов отмечалась до сих пор на икосаэдрических молекулах, что объясняется легкостью их анализа и высокой, по сравнению с остальными гиперфуллеренами, стабильностью. Но икосаэдрические гиперфуллерены – лишь яркий пример из полного многообразия фуллеренов. Их симметрия может быть любой, вплоть до тривиальной. Соответственно, их форма также может быть разнообразной. Как любой фуллерен, гиперфуллерен содержит 12 пентагонов. Их взаимное расположение определяет площадь и конфигурацию свободных от пентагонов гексагональных сеток и, как следствие, многогранную форму в целом. Участки поверхности, содержащие пентагоны, обладают наибольшей кривизной и задают вершины получаемого гиперполиэдра. Так, при равномерном распределении одиночных пентагонов по поверхности, гиперфуллерен примет форму икосаэдра, при неравномерном – любого другого 12-вершинника, в том числе того же икосаэдра, но с пониженной симметрией. Пентагоны могут быть смежными или располагаться

относительно близко друг от друга. В этом случае содержащий их участок, малый по сравнению с общей поверхностью гиперфуллера, можно принять за "вершину". Группирование пентагонов снижает число вершин гиперполиэдра с 12 до минимума – 4, а 3- и 2-вершинники соответствуют формам, неприводимым к полиэдрическим. Группирование 12 пентагонов по вершинам гиперполиэдра представляет собой известную задачу теории разбиений – поиск всех способов представления числа через его слагаемые [2].

Число пентагонов, определяющих вершину гиперполиэдра, ограничено. Согласно следствию леммы из [3], поведение гексагональной сетки вокруг группы пентагонов зависит от их числа n : при $n < 6$ сетка расширяется, при $n > 6$ – сужается, при $n = 6$ – продолжается, не расширяясь и не сужаясь. Если число пентагонов больше 6, то дальнейшее продолжение гексагональной сетки вокруг данной вершины ведет к смыканию молекулы. Площадь ее поверхности оказывается сравнимой с площадью участка, соответствующего вершине. В итоге понятие вершины теряет смысл. Если число пентагонов равно 6, возможна единственная ситуация, при которой остальные 6 пентагонов образуют вторую вершину на другом конце бесконечно продолжающейся трубки. Получаемые в этом случае молекулы – тубулены имеют линейную (одномерную) форму и являются единственно возможными 2-вершинниками. С учетом сказанного, существуют лишь 48 возможных наборов пентагонов, определяющих вершины гиперполиэдров (жирным шрифтом указано число вершин гиперполиэдра, в скобках – число соответствующих наборов):

12(1): 1111111111, 11(1): 1111111112, 10(2): 1111111113, 1111111122, 9(3): 1111111114, 1111111123, 111111222, 8(5): 11111115, 11111124, 11111133, 11111223, 11112222, 7(6): 1111125, 1111134, 1111224, 1111233, 1112223, 1122222, 6(9): 111135, 111144, 111225, 111234, 111333, 112224, 112233, 122223, 222222, 5(9): 11145, 11235, 11244, 11334, 12225, 12234, 12333, 22224, 22233, 4(8): 1155, 1245, 1335, 1344, 2235, 2244, 2334, 3333, 3(3): 255, 345, 444, 2(1): 66. Каждая цифра в наборе указывает число пентагонов в вершине. Так, набор 1111111111 означает, что в каждой вершине гиперполиэдра располагается по одному пентагону, а число вершин равно 12. Таковыми являются все икосаэдрические гиперфуллерены. К набору 3333 (4 вершины по три пентагона) относятся все тетраэдрические гиперфуллерены. Набор 66 соответствует тубуленам.

Морфологически гиперфуллерены можно разбить на три группы – по числу размерностей. Первая группа – 3-мерные молекулы, соответствующие 4- ... 12-вершинникам – описываются наборами пентагонов с числом вершин от 4 до 12. Вторая группа – уплощенные, 2-мерные молекулы, на поверхности которых пентагоны располагаются в одной плоскости. Они могут рассматриваться как многоугольники. Третья группа – 1-мерные молекулы – тубулены с набором 66. Набор пентагонов не фиксирует гиперполиэдр однозначно, т.к.

не задает взаимного расположения вершин, но накладывает ряд ограничений, в т.ч. на симметрию и, стало быть, стабильность молекулы.

По аналогии с икосаэдрическими гиперфуллередами, имеющими чаще всего симметрию 235, а не -3-5m, макросимметрия других гиперфуллеренов обычно не совпадает с симметрией образованных ими гиперполиэдров. Факт такого несовпадения можно обнаружить, рассматривая наборы пентагонов. Например, октаэдрические гиперфуллерены не могут иметь симметрию куба. Единственный набор из 6 одинаковых группировок пентагонов – 222222 (все остальные наборы делают вершины гиперполиэдра заведомо неэквивалентными) указывает на расположение в каждой вершине двух пентагонов. Через такие вершины не могут проходить оси 4-го порядка. Октаэдрический гиперфуллерен будет иметь пониженную симметрию, являющуюся подгруппой $m\bar{3}m$, какую именно – зависит от взаимного расположения пентагонов. Для набора 3333 (по 3 пентагона в каждой из 4 вершин) возможны тетраэдры кубической сингонии с проходящими через вершины осями 3-го порядка. В этом случае симметрии гиперфуллерена и гиперполиэдра совпадают. Если не учитывать способ размещения пентагонов в вершинах, симметрия гиперполиэдра оказывается выше или равна симметрии порождающего его гиперфуллерена. Иначе говоря, группа симметрии гиперфуллерена является подгруппой симметрии гиперполиэдра.

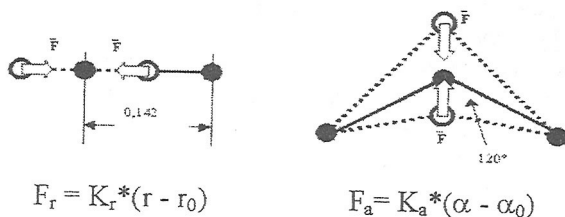


Рис. 3. Взаимодействия между атомами и связями в модели гиперфуллерена.

Основной довод в пользу существования полиэдрических гиперфуллеренов – у плоские гексаго-

нальных сеток между 5-членными циклами – может быть проверен количественными расчетами, а именно сравнением энергетических характеристик одной и той же молекулы в случае ее сферической и полиэдрической форм. Автором предложен другой подход – моделирование самих молекул, основанное на двух видах упругих взаимодействий: межатомных, стремящихся расположить каждую пару смежных атомов на некотором оптимальном расстоянии, и угловых, раздвигающих пару выходящих из каждого атома связей на оптимальный угол (рис. 3). Оптимальные значения $r_0 = 0.142$ нм, $\alpha_0 = 120^\circ$ приняты в соответствии с параметрами бесконечной графитовой сетки. С помощью модели для ряда гиперфуллеренов получены 3-мерные структуры, подтверждающие их полиэдрическую, уплощенную и вытянутую формы. На рис. 4 изображены кубический (а), пирамидальный (б), икосаэдрический (с) и уплощенный гексагональный гиперфуллерены (д) и тубулен (е).

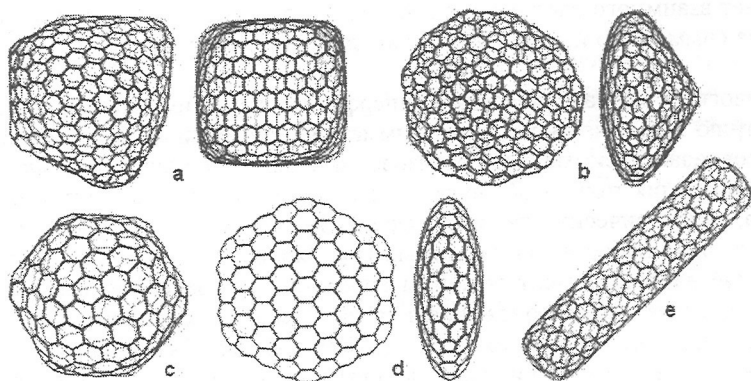


Рис. 4. Гиперфуллерены.

Изложенный подход к описанию гиперфуллеренов позволяет перевести их из бесконечного в конечное многообразие 2- ... 12-вершинников за счет отождествления групп пентагонов с “вершинами” полиэдра. На форму молекулы влияет расположение 12 пентагонов. В случае группировки пентагонов в малых областях поверхности их можно отождествить с вершинами гиперполиэдра. Симметрия гиперфуллерена является подгруппой симметрии получаемого гиперполиэдра. Гиперфуллерены представляют особый интерес как структуры с большим внутренним объемом. Их получение, за исключением тубуленов, сопряжено с технологическими сложностями. Основная задача – синтез гиперфуллеренов с заданными характеристиками – не может быть решена без детального изучения их структуры. В минералогическом плане многослойные гиперфуллерены могут иметь отношение к глобулярным структурам шунгита – полым вытянутым образованиям, составленным из искаженных графитовых слоев [4].

Список литературы

1. Kroto H., McKay K. The formation of quasi-icosahedral spiral shell carbon particles // *Nature*. 1988. V 331. N 28. P 328-331.
2. Эндрюс Г. Теория разбиений. М.: Наука, 1982. 256 с.
3. Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G. A theorem on the fullerenes with no adjacent pentagons // *Acta Cryst.* 2004. A60. P 278-280.
4. Зайденберг А.З., Ковалевский В.В. и др. О фуллереноподобных структурах шунгитового углерода // *Журнал физ. химии*. 1996. Т. 70. № 1. С. 107-110.

О МАКСИМАЛЬНОЙ ГРАНИ ПОЛИЭДРА

О.Н. Ярыгин

Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета, Апатиты

Из теоремы Эйлера, связывающей числа V вершин, E рёбер и F граней полиэдра $V - E + F = 2$ выводится ряд простых теорем, нужных для обоснования формулы, определяющей максимальное число ребер у грани полиэдра при данных V , E и F .

Теорема 1. Число ребер E достигает минимума $3V/2$ на простом полиэдре.

Теорема 2. Для произвольного полиэдра справедливы неравенства

$$2V - 4 \geq F \geq V/2 + 2, \quad 2F - 4 \geq V \geq F/2 + 2$$

Доказательства приведены в [5]. Полиэдры существуют только для сочетаний V и F , удовлетворяющих теореме 2 (серые клетки в табл. 1). Описания полиэдров в [3] также иллюстрируют результат.

Табл. 1. Допустимые для полиэдров соотношения V и F .

F \ V	4	5	6	7	8	9	10	11
4	■							
5		■	■					
6		■	■	■	■			
7			■	■	■	■	■	
8			■	■	■	■	■	■
9				■	■	■	■	■
10				■	■	■	■	■
11					■	■	■	■

Назовем “максимальной” грань полиэдра $P(V, F)$, имеющую наибольшее число вершин. Ясно, что таких граней может быть несколько, даже все грани могут быть “максимальными”. Примерами могут служить платоновы полиэдры (тетраэдр, куб, октаэдр, додекаэдр, икосаэдр) и не только они. В каждой клетке табл. 2 указано значение M — число вершин “максимальной” грани

семейства полиэдров $P(V, F)$ и гранные символы полиэдров, на которых это значение достигается. Напомним, что гранный символ представляет собой последовательность чисел $\{a_3, a_4, \dots, a_M\}$, где a_i равно числу i -угольных граней. Табл. 2 подсказывает следующую гипотезу: при $V \geq F$ число M равно $F-1$, при $V < F$ число M равно $2V-F-1$. Предварительно докажем следующую теорему.

Таблица 2. Описания полиэдров из [3].

	F: 4	5	6	7	8
V: 4	M=3 {4}				
5		M=4 {4,1}	M=3 {6}		
6		M=4 {2,3}	M=5 {5,0,1}	M=4 {6,1}	M=3 {8}
7			M=5 {3,2,1}	M=6 {6,0,0,1}	M=5 {7,0,1}
8			M=5 {2,2,2}	M=6 {4,2,0,1}	M=7 {7,0,0,0,1}
9				M=6 {2,4,0,1} {3,2,1,1}	M=7 {5,2,0,0,1}
10				M=6 {2,2,2,1} {2,3,0,2}{3,0,3,1}	M=7 {3,4,0,0,1} {4,2,1,0,1}
11					M=7 {3,2,2,0,1} {3,3,0,1,1}{4,0,3,0,1}
12					M=7 {2,2,3,0,1} {2,3,1,1,1} {2,4,0,0,2} {3,1,2,1,1}

Теорема 3. Максимальное значение F при заданном V достигается на полиэдре $P_3(V, F)$, у которого все грани треугольные.

Доказательство. Если у полиэдра P имеется не треугольная грань F_0 , то на проекции Шлегеля, построенной на любой другой грани, можно провести диагональ внутри многоугольника, являющегося проекцией грани F_0 . В результате число проекций граней полиэдра и число самих граней F увеличится на 1. Если у образовавшегося полиэдра имеется не треугольная грань, то же действие можно повторить, что увеличит число граней еще на 1. Процесс можно повторять до тех пор, пока все грани полиэдра не станут треугольными, т.е. образуется симплициальный полиэдр $\{F\}$. Теорема доказана. Действительно, в клетках (4,4), (5,6) и (6,8) табл. 2 оказываются только полиэдры $\{4\}$, $\{6\}$ и $\{8\}$.

Теорема 4. При $F \leq V$ верно равенство $M = F - 1 = V/2 + 1$.

Доказательство. Число $F - 1$ является верхней границей для числа M полиэдра $P(V, F)$, т.к. не существует полиэдра с гранью, имеющей число вершин (сторон), равное числу граней полиэдра. Действительно, если “максимальная” грань имеет F сторон, а каждой стороне этой грани инцидентна еще одна грань, то полиэдр будет иметь не менее $(F + 1)$ граней, что противоречит предположению об F гранях полиэдра. Существование полиэдра, имеющего грань с $F - 1$ вершинами, доказывается построением. При $F = V$ можно построить $(F - 1)$ -гранную пирамиду $\{F - 1, 0 \dots 0, 1\}$ и ее проекцию Шлегеля в виде $(F - 1)$ -угольного “колеса” [1, 2] (рис. 1). В табл. 2 они попадают в диагональные клетки. Заметим, что среди простых F -эдров существует т.н. “клин” $\{2, F - 4, 0 \dots 0, 2\}$ с $(F - 1)$ -угольными гранями (рис. 2).

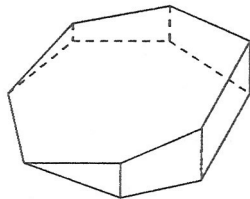
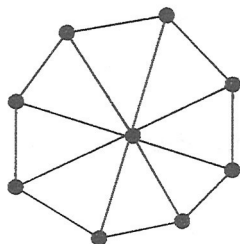


Рис. 1 (слева). Проекция Шлегеля для пирамиды $\{F - 1, 0 \dots 0, 1\}$, $F = 9$.

Рис. 2 (справа). Клин $\{2, F - 4, 0 \dots 0, 2\}$, $F = 8$.

Аналогичный вид имеют полиэдры $\{2, 2, 2\}$, $\{2, 3, 0, 2\}$ и $\{2, 4, 0, 0, 2\}$, находящиеся в клетках (8,6), (10,7) и (12,8) табл. 2. Для простых полиэдров из теоремы Эйлера следует $F = V/2 + 2$. В табл. 2 простые полиэдры попадают в клетки, удовлетворяющие этому равенству: (4,4), (6,5), (8,6), (10,7) и (12,8). Таким образом, $M = F - 1 = V/2 + 1$. Но последняя формула имеет смысл лишь при $F \leq V$, т.к. $F \geq 4$, $V \geq 4$. Итак, при $F \leq V$ наибольшее возможное значение для M достигается. Теорема доказана.

Но при $F > V$ соотношение теоремы 2 невозможно. Но такие полиэдры, очевидно, существуют. Они двойственны полиэдрам области $V > F$. Например, полиэдр $\{10\}$ из клетки (7, 10) является двойственным полиэдру $\{0, 5, 2\}$ из клетки (10, 7). В табл. 1 он не показан, т.к. не имеет 6-угольной грани, являющейся “максимальной” для полиэдров $P(10, 7)$.

Теорема 5. При заданном числе M вершин “максимальной” грани полиэдра максимальное число граней F достигается на полиэдре, у которого все остальные грани треугольные, при этом $F_{\max} = 2V - M - 1$.

Доказательство первого утверждения аналогично доказательству теоремы 3, с той разницей, что проекция строится на “максимальную” грань и не подвергается разбиению диагоналями. Далее, пусть при заданных V и F “максимальная” грань полиэдра имеет M вершин, остальные грани треугольные.

Тогда удвоенное число рёбер получается сложением ребер всех граней, из которых $(F-1)$ – 3-угольные и одна – M -угольная: $2E = 3(F-1) + M$. По формуле Эйлера, $2E = 2(V + F - 2)$. Поэтому $2V + 2F - 2 = 3F - 3 + M$, откуда и следует утверждение теоремы. Сформулируем заключительную теорему.

Теорема о максимальной грани полиэдра. Для произвольного полиэдра $P(V, F)$ число вершин его максимальной грани задается формулой: $M = F - 1$ при $F \leq V$ и $M = 2V - F - 1$ при $F > V$.

Доказательство. Первое равенство следует из теоремы 4. Рассмотрим второе равенство. Как следует из теоремы 5, при данных V и M значение $F = 2V - M - 1$ достижимо. Но является ли при этом M максимальным для данных F и V ? Пусть в семействе полиэдров вида $P(V, F)$ существует полиэдр $P_0(V, F)$ такой, что его максимальная грань имеет $(M+k)$ вершин, $k \geq 1$. По теореме 5, максимальное число граней, которое он может иметь, равно

$$F_{\max} = 2V - (M + k) - 1 = 2V - M - 1 - k < F,$$

что является противоречием. $M = 2V - F - 1$ является максимальным и достигаемым значением. Теорема доказана.

Полученные результаты полезны при разработке алгоритмов, связанных с поиском циклов на графах, т.к. позволяют ограничить число перебираемых вариантов. Зная максимальное число вершин в цикле, при построении дерева поиска удастся “обрезать” ветви длины более M . Табл. 2 продолжается до любой заданной клетки (V, F) и представляет собой интересный инструмент для поиска закономерностей на множестве полиэдров. Такой подход позволяет констатировать существование тех или иных полиэдров до их компьютерного моделирования [4,5].

Список литературы

1. Харари Ф. Теория графов. М.: Мир, 1973.
2. Берж К. Теория графов и её применения. М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
3. Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: приводимые 4-...8-эдры, простые 9- и 10-эдры. Апатиты: Изд-во К & М, 1999.
4. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Ярыгин О.Н. Грануломорфология: простые 12- и 13-эдры. Апатиты: Изд-во К & М, 2000.
5. Ярыгин О.Н. Теорема о «максимальной» грани полиэдра // Теория и методика профессионального образования в научно-педагогических исследованиях. М.: Институт общего среднего образования РАО, 2001. С. 376-386.

Минералогия и петрография



Н.П. Богданов-Бельский (1868-1945)
Устный счет. В народной школе С.А. Рачинского. (1896)

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЗАДАЧИ СТЕРЕОЛОГИЧЕСКОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ РАЗМЕРОВ ЗЕРЕН В АГРЕГАТЕ

Ю.Л. Гульбин. Санкт-Петербургский государственный горный институт (технический университет), Санкт-Петербург

Гранулометрические исследования – неотъемлемая составляющая морфометрии минеральных агрегатов. Распределение зерен по размерам выступает ценным источником информации о генезисе, влияет на технологические свойства горных пород и руд и учитывается при классификации петрографических структур. В основе гранулометрического анализа лежит процедура стереологической реконструкции или построения вероятностного распределения размеров зерен по распределению размеров их случайных сечений. Универсальным алгоритмом решения задачи служит метод последовательных подстановок [4], значительно усовершенствованный в последние годы благодаря использованию компьютерных технологий [2, 5, 6, 8].

Несмотря на очевидный прогресс, актуальной проблемой стереологии является оценка правильности осуществляемых реконструкций. Из-за низкой устойчивости результатов стереологических пересчетов, вызванной накоплением ошибок при вычислении частот встречаемости зерен малых размерных классов, остается открытым вопрос о точности определения параметров и вида гранулометрической кривой. С целью изучения этого вопроса было выполнено компьютерное моделирование основных стереологических закономерностей в приближении эквивалентных сфер и эквивалентных призм.

В серии численных экспериментов имитировалось хаотическое заполнение единичного объема сферами со случайно распределенными диаметрами с последующим построением распределения размеров их сечений серией параллельных плоскостей. Пересчеты выполнялись на основе геометрической шкалы размерных интервалов по формуле [2]

$$n_j^r = \frac{1}{p_{qj} r_j} \left(n_j^R - \sum_{i=j}^{q-1} n_{i+1}^r p_{q+j-i-1} r_{i+1} \right), \quad j = q, q-1, \dots, 1,$$

где n_j^r , n_i^R – частоты встречаемости сфер и их сечений заданных размерных классов, r_j – диаметры сфер (середины соответствующих размерных интервалов), $p_{(i)}$ – вероятности случайных сечений единичной сферы. Ставилась задача сравнения реконструированного распределения с исходным распределением диаметров сфер.

Корректное решение подобных задач может быть получено с помощью критерия согласия. В рассматриваемом случае их применение ограничено из-за несоответствия суммы частот реконструированного распределения (числа сфер) сумме частот наблюдаемого распределения (числу сечений), обычно приводящего к искусственному увеличению объема выборки. Поэтому гипотеза H_0 о сходстве исходного и реконструированного распределений диаметров сфер подменялась гипотезой H_0^* о сходстве наблюдаемого и модельного распределений размеров сечений.

Для построения модельного распределения на основе реконструированного распределения диаметров сфер оценивались параметры и теоретические частоты исходного распределения n_j^{R*} , после чего выполнялось преобразование данных, обратное стереологической реконструкции

$$n_i^{R*} = \sum_{j=1}^q n_j^{R*} p_{ji} r_j, \quad i = 1, 2 \dots q.$$

Рассчитанные частоты модельного распределения n_i^{R*} вместе с частотами наблюдаемого распределения размеров сечений n_i^R использовались для вычисления статистики χ^2 Пирсона. Поскольку ее предельные распределения существенно зависят от способа группировки наблюдений и метода оценивания параметров [3], величина χ^2 минимизировалась. Минимизированное значение критерия использовалось для проверки гипотезы H_0^* . Если она принималась, делался вывод о справедливости гипотезы H_0 .

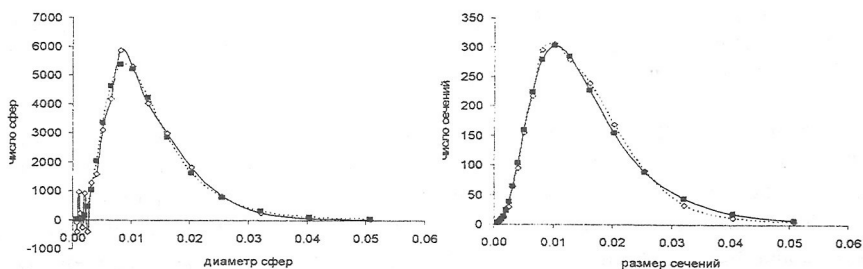


Рис. 1. Пример стереологической реконструкции: исходное (черное) и реконструированное (белое) распределения диаметров сфер, модельное (черное) и наблюдаемое (белое) распределения размеров сечений. Число сфер – 30000, число сечений – 2000, $\chi^2 = 13.84$, $\chi^2_{0.05; 12} = 21.03$.

В ходе моделирования задавалось несколько видов распределений диаметров сфер. На рис.1 и в табл.1 показаны результаты моделирования для сфер, диаметры которых распределены по логнормальному закону. Как видно из таб-

лицы, среднеквадратическая ошибка оценок параметров гранулометрических распределений, рассчитанных по предлагаемой методике, в этом случае не превышает 2-4 %. При этом оценки оказываются лишь незначительно смещенными относительно истинных значений. Точность оценивания возрастает, если значения параметров рассчитываются путем минимизации статистики χ^2 . Эмпирическая функция распределения минимизированной χ^2 , рассчитанной при справедливой гипотезе H_0^* , практически неотличима от теоретического χ^2_{k-3} -распределения (рис. 2). При верной альтернативе H_1^* , близкой к распределению сечений сфер, диаметры которых изменяются по логнормальному закону (например, в случае, если распределение диаметров сфер подчиняется закону Рэлея), мощность критерия близка к 1.

Таблица 1. Точность оценок параметров гранулометрических распределений по результатам компьютерного моделирования (сферы).

Оценка	Среднее значение	Стандартная ошибка	Коэффициент вариации, %	Смещение отн. истинного значения, %
m^*	0.0102 (0.0103)	0.0002 (0.0003)	2 (3)	2 (3)
a^*	0.512 (0.503)	0.0108 (0.0254)	2 (5)	2 (1)
Σn_j^{r*}	30409	1114	4	1

Примечание. Число симуляций $N = 300$, в ходе каждой симуляции на основе геометрической шкалы с числом размерных интервалов 20 строилось распределение размеров сечений 2000 сфер. Рассчитанные частоты n_j^R служили входными данными для стереологической реконструкции. Параметры исходного распределения диаметров сфер: $m = 0.01$; $a = 0.5$; $\Sigma n_j^r = 30000$. Для оценок m^* и a^* приведены характеристики, рассчитанные на основе данных, полученных методом наибольшего правдоподобия (в скобках) и путем минимизации статистики χ^2 (перед скобкой).

В ходе последующих опытов рабочий объем заполнялся произвольно ориентированными ромбическими призмами с одинаковым соотношением длин ребер. С целью задания равномерного распределения ориентировок сферические координаты выделенного направления каждой призмы определялись разыгрыванием случайных величин φ и $\sin \theta$, равномерно распределенных на интервалах $(0; 2\pi)$ и $(-1; 1)$, соответственно. Для проверки правильности программы в одном из экспериментов были определены вероятности 106 сечений куба с разным числом вершин; найденные значения оказались близки к теоретическим [7], что позволило уточнить ранее полученные результаты [1]. Стереологическая реконструкция размеров призм выполнялась по формулам:

$$\Sigma n_{j+k}^R = \frac{1}{p_{q-k}} \left(n_j^R - \sum_{i=j}^{q-1} \Sigma n_{i+k+1}^R p_{q-k+j-i-1} \right), \quad j = q, q-1, \dots, 1,$$

$$\Sigma n_{j+k}^{R'} = \Sigma n_{j+k}^R - \sum_{i=j}^{j+k-1} \Sigma n_i^R p_{q+j-i}, \quad j = q, q-1, \dots, 1, \quad n_{j+k}^{R'} = \frac{\Sigma n_{j+k}^{R'}}{r_{j+k}}.$$

где n_j^R , $n_j^{R'}$ – частоты встречаемости призм и их сечений, r_j – средний диаметр призм (средний размер по всем ориентировкам), $p_{(i)}$ – вероятности случайных сечений призмы заданной формы, p_{q-k} – вероятность модального класса, Σn_{j+k}^R – суммарное число сечений призм в первом приближении (с учетом вкладов сечений больших размерных классов), $\Sigma n_{j+k}^{R'}$ – суммарное число сечений призм во втором приближении (с учетом вкладов сечений призм меньших размерных классов). Относительно ранее предложенной схемы пересчетов [2] рассматриваемый алгоритм обладает важным преимуществом: в нем использованы вероятности $p_{(i)}$, расположенные левее и правее модального класса, что способствует минимизации ошибок и повышению качества реконструкции.

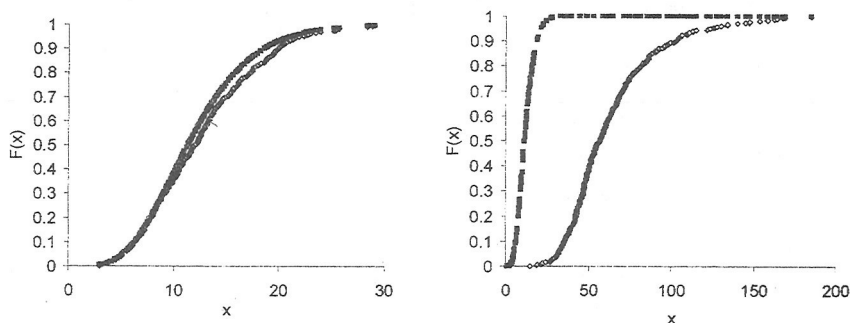


Рис. 2. Распределение статистики χ^2 (белое) и теоретическое χ^2_{12} -распределение (черное) при справедливой гипотезе H_0^* (слева) и верной альтернативе H_1^* (справа). Число симуляций $N = 300$. H_0 – логнормальный закон, H_1 – закон Рэлея.

Сравнение реконструированного распределения с исходным распределением размеров призм осуществлялось по описанной методике. Результаты моделирования для призм с отношением длин ребер 1:1:5 и 1:5:5, размеры которых распределены по логнормальному закону, показаны в табл. 2. Как и в случае сфер, точность оценок весьма высока для медианы (m) и параметра формы распределения (a) независимо от формы призм, менее точно оценивается число призм в единичном объеме агрегата. Сходным образом распределение ми-

минимизированной статистики χ^2 позволяет использовать ее в качестве критерия согласия для проверки статистических гипотез о законе распределения.

Таким образом, в ходе решения задачи продемонстрирована высокая точность стереологической реконструкции при нахождении оценок параметров и обоснована возможность экспериментальной проверки гипотез о виде распределения размеров зерен в агрегате. Проведенное исследование позволит расширить горизонты применимости морфометрии в минералогии, будет способствовать превращению стереологической реконструкции в одну из рутинных операций гранулометрического анализа. Интерес представляет изучение стереологии полиэдров различных сингоний (гексагональной, моноклинной и др.), "не вписывающихся" в приближения эквивалентных сфер и призм и требующих для реконструкции знания вероятностей случайных сечений полиэдра. Актуальным направлением применения разработанной методики является выявление законов природных гранулометрических распределений с целью интерпретации генезиса магматических и метаморфических горных пород.

Таблица 2. Точность оценок параметров гранулометрических распределений по результатам компьютерного моделирования (призмы).

Оценка	Среднее значение	Стандартная ошибка	Коэффициент вариации, %	Смещение относительно истины, %
<i>призмы с соотношением длин ребер 1:1:5</i>				
m^*	0.0098	0.0002	2	2
a^*	0.5060	0.0165	3	1
$\sum n_j^*$	33275	1134	4	11
<i>призмы с соотношением длин ребер 1:5:5</i>				
m^*	0.0099	0.0002	2	1
a^*	0.5015	0.0153	3	0
$\sum n_j^*$	31325	2117	7	4.4

Примечание. Число симуляций $N = 300$, в ходе каждой симуляции на основе геометрической шкалы с числом размерных интервалов 20 строилось распределение размера s^* (длины наибольшей стороны) сечений 2000 призм. Для вычисления частот n_{j-k}^* этот размер заменялся средним диаметром [2]. Параметры исходного распределения длины ребра s призм: $m = 0.01$; $a = 0.5$; $\sum n_j^* = 30000$. Для оценок m^* и a^* приведены характеристики, рассчитанные на основе данных, полученных путем минимизации статистики χ^2 .

Автор признателен Я.В. Кучериненко за полезные консультации, послужившие стимулом для написания настоящей статьи.

Исследование поддержано грантами Американского фонда гражданских исследований и развития ST-015-02 и РФФИ 06-05-64312.

Список литературы

1. Гульбин Ю.Л. О стереологических реконструкциях размеров зерен в агрегатах // Зап. ВМО. 2004. № 4. С. 71-91.
2. Гульбин Ю.Л. Метод последовательных подстановок и его использование для гранулометрического анализа минеральных агрегатов // Обогащение руд. 2006. № 4. С. 30-36.
3. Лемешко Б.Ю., Постовалов С.Н. О зависимости предельных распределений статистик хи-квадрат Пирсона и отношения правдоподобия от способа группирования данных // Заводская лаборатория. 1998. Т. 64. № 5. С. 56-63.
4. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. М.: Металлургия, 1970. 375 с.
5. Han J.-H., Kim D.-Y. Determination of three-dimensional grain size distribution by linear intercept measurement // Acta Mater. 1998. V 46. P 2021-2028.
6. Higgins M.D. Measurement of crystal size distributions // Amer. Miner. 2000. V 85. P 1105-1116.
7. Ohser J., Nippe M. Stereology of cubic particles: various estimators for size distributions // J. Micros. 1997. V 187. P 22-30.
8. Sahagian D.L., Proussevitch A.A. 3D particle size distributions from 2D observations: stereology for natural applications // J. Volcanol. Geotherm. Res. 1998. V 84. P 173-196.

К ИСТОРИИ РАЗВИТИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ГЕОХИМИИ И ПЕТРОЛОГИИ

В.К. Каржавин. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

Математическое (физико-химическое) моделирование с помощью ЭВМ — новое и весьма перспективное направление исследований геохимических, петрологических, химико-технологических и других процессов. С его помощью можно решать широкий класс задач, недоступных ранее. Математическое моделирование позволяет воспроизводить определённым образом подобранные условия физико-химической ситуации для изучения взаимоотношений между компонентами в сложных системах на основе термодинамики. Ярким примером тому является математическое моделирование природных процессов, базирующихся на основе экспериментальной, эмпирической и термодинамической информации.

На протяжении многих лет в петрологических и геохимических исследованиях использовались физико-химические методы в виде решений отдельных химических уравнений для анализа полей устойчивости минералов и водных растворов в координатах условно независимых параметров состояния системы. Давно используется решение задач термодинамики с учетом уравнений действия и баланса масс для расчетов равновесного состава в сложных системах на базе стехиометрических уравнений и констант равновесия. Этот подход позволял при задаваемых параметрах и исходном химическом составе системы определять равновесный состав ее простых и сложных компонентов. Большой популярностью у исследователей получил метод сокращения числа неизвестных в системах химических уравнений путём последовательных подстановок, где одновременно учитывались уравнения действия и баланса масс. Такой подход базировался на доказательстве того, что система уравнений констант равновесия и материального баланса имеет единственное решение, отвечающее физическому смыслу [1]. Этот метод был использован и нами при оценке условий существования и состава газов в магматическом процессе [2]. С появлением ЭВМ в 1958 г. впервые была показана возможность численной минимизации свободной энергии Гиббса для расчёта химического равновесия идеальной газовой смеси [3]. Новый подход в значительной степени упростил расчёт сложных систем, т.к. метод минимизации полностью соответствовал гиббсовскому критерию равновесия. Впоследствии он был распространен на многофазные гетерогенные системы и химические равновесие при разнообразном выборе независимых параметров состояния (P , T), а также активностей компонентов, концентраций и т.д.

В науках о Земле метод минимизации впервые применен Е. Хильдом и Дж. Найфтоном [4] для расчёта химического равновесия в гомогенных смесях

вулканических газов вулкана Килауза. Методы равновесной термодинамики, оперирующие состояниями системы для построения моделей природных процессов, нашли широкое применение в работах Г. Хельгесона с сотрудниками [5, 6], иркутской школы И.К. Карпова [7-10], в работах И.Л. Ходаковского [11], Ю.В. Шварова [12] и других. Так, метод был успешно использован для расчёта различных вариантов первичного состава планетных образований солнечной системы (Венера и др.) [13, 14]. В результате широкого использования математического моделирования установлено, что расчёт химических равновесий путём численной минимизации свободной энергии Гиббса позволяет успешно исследовать природные процессы минералообразования, а также различные варианты гомогенных и гетерогенных сложных открытых и закрытых систем. Определение компонентного и фазового состава при различных давлениях и температурах стало главной задачей физико-химического моделирования в геохимических и петрологических исследованиях. К настоящему времени разработаны теоретические основы физико-химического моделирования, создано программное обеспечение, на многих примерах продемонстрирована его научная и практическая эффективность. Возможности физико-химического моделирования на ЭВМ определяются рядом факторов:

- корректной постановкой задачи и выбором адекватной математической модели;
- наличием достоверной исходной информации (химического и минерального состава), без чего невозможна достоверность результатов; так, в расчётах часто учитывается лишь малая часть соединений, принимающих участие в реакциях;
- полнотой, достоверностью и точностью данных термодинамических величин элементов, химических соединений, минералов; при этом проблемой является отсутствие термодинамической информации для соединений в твёрдом, жидком и газообразном состояниях.

Важным фактором является выявление и соответствие фаз системы и отдельных компонентов (в т.ч. возможных) базовой модели и данному исследованию. Выполнение этих требований тем более необходимо ввиду того, что за основу расчёта берётся исходный химический состав вещества, находящегося на конечной (или промежуточной) стадии процесса. Моделирование на ЭВМ служит не просто способом наглядного и достоверного отображения фактических данных, но инструментом для получения новой информации о процессах, конечные результаты которых мы можем экспериментально воспроизвести, экономя громадное количество времени.

В качестве примера создадим мультисистему, в состав которой возьмём независимые компоненты (элементы): Si, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K, Cu, Ni, Pt, Pd, H,

C, O, S. Независимые компоненты удобны при изучении равновесного состояния, причём их число в мультисистеме всегда меньше числа зависимых компонентов. Расчётную матрицу мультисистемы представим 23 (можно и большим числом) зависимыми компонентами (это силикатно-сульфидные химические соединения) и флюидной фазой, которая включает 9 наиболее частых компонентов: H_2O , H_2 , O_2 , CO , CO_2 , H_2S , SO_2 , S_2 , CH_4 . Численную реализацию моделей на ЭВМ проведём при помощи метода минимизации свободной энергии Гиббса с базами данных термодинамических величин химических соединений [10]. В результате математического моделирования мы получим состав газа, твёрдой и жидкой фаз. При этом можно дополнительно определить (при заданных P и T) ионный состав и силу раствора (если он присутствует), величины pH и Eh среды, объём раствора и твёрдой фазы. Исходными данными для такого рода исследований являются химический и предполагаемый минеральный состав горной породы. Расчёт состава независимых компонентов мультисистем проводится перерасчётом химического анализа на их мольное содержание в 1 кг образца.

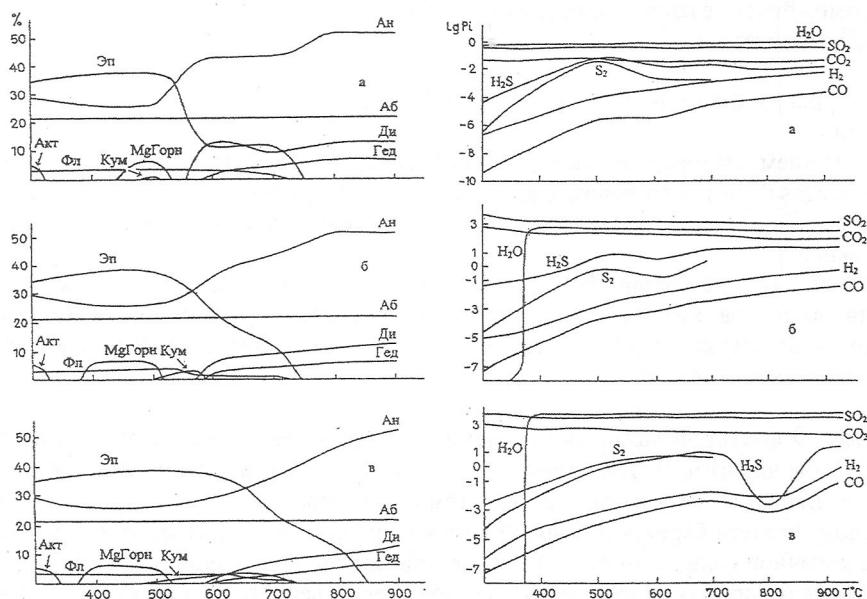


Рис. 1 (слева). Поведение компонентов силикатных фаз модельной мультисистемы в зависимости от T при разных P : а - 1, б - 4000, в - 8000 бар.

Рис. 2 (справа). Поведение газообразных компонентов модельной мультисистемы в зависимости от T при разных P : а - 1, б - 4000, в - 8000 бар.

Пусть исходный состав модели следующий: Al – 4.53545; Ca – 3.06537; Fe – 0.93370; Si – 7.85210; Mg – 0.56766; Na – 0.83152; K – 0.08872; C – 0.02487; H – 1.54634; O – 28.49853; Pt – $2.230 \cdot 10^{-6}$; Pd – $4.01 \cdot 10^{-5}$; Cu – 0.1409; Ni – 0.1119; S – 0.6455. Термодинамические расчёты модельной мультисистемы проведены в широком диапазоне Т (3000 – 9000 °С) и Р (1 – 8000 бар). На рис. 1 даны результаты расчёта в виде изменения концентраций твёрдых фаз в системе по мере снижения Т при трёх значениях Р.

На рис. 2 при этих же параметрах Р и Т представлены расчётные данные поведения газообразных компонентов. Анализируя этот материал и полученные расчётные данные, удалось проследить наличие двухактной инверсии валентного состояния серы в серосодержащих компонентах в интервале температур 300-500 и 700-800 °С. Этот эффект чётко прослеживается на примере изменения концентрации H_2S , SO_2 (низкотемпературная) и S_2 (высокотемпературная) при относительно плавном изменении парциального давления кислорода (P_{O_2}). Установленное явление согласуется с формами существования соединений ЭПГ в системе.

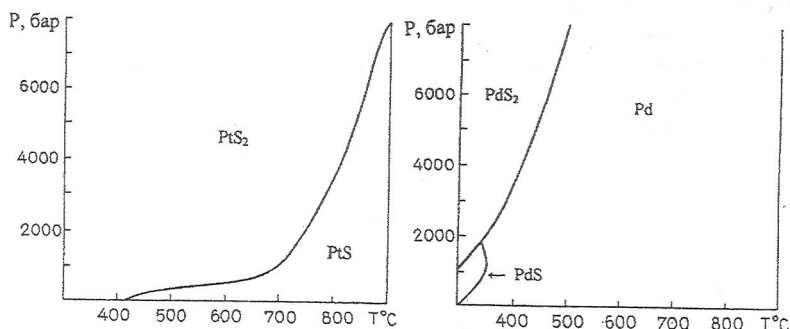


Рис. 3. Поля устойчивости системы, содержащей Pt, Pd и их сульфиды, в зависимости от Т и Р (модельная мультисистема).

На рис. 3 видно, что в области высоких Р и Т основными соединениями ЭПГ являются дисульфид платины (PtS_2) и палладий (Pd) в элементарной форме. В области высокотемпературной инверсии серы происходит частичное превращение $\text{PtS}_2 \leftrightarrow \text{PtS}$. Но при снижении Р и Т (низкотемпературная инверсия) отмечается обратный процесс $\text{PtS} \leftrightarrow \text{PtS}_2$ (область низких давлений), а у палладия появляется промежуточный низкотемпературный сульфид. В области низких давлений имеет место превращение $\text{Pd} \leftrightarrow \text{PdS}$, а в области высоких давлений $\text{Pd} \leftrightarrow \text{PdS}_2$. В результате дополнительных исследований с целью оценки Р-Т параметров метаморфизма (метод TWQ) установлено, что на стадии автометаморфизма магматических пород Pd может существовать в элементарной форме, а Pt – в дисульфидной (PtS_2). Физико-химические условия

среды окислительные ($P_{O_2} \sim 10^{-13}$), при этом отмечается элементарная сера, равновесная с SO_2 и H_2S . По мере снижения T и P флюидный режим среды становится восстановительным ($P_{O_2} \sim 10^{-22}$). При этих условиях Pd переходит в дисульфид PdS_2 и затем в сульфид PdS , а с повышением T , в амфиболитовую фацию метаморфизма, вновь переходит в элементарную форму. При этих условиях Pt может существовать в форме PtS_2 , являясь "сквозным" минералом.

Отметим, что с процессами метаморфизма связано характерное изменение концентраций газообразных компонентов (H_2 , CO_2 , CH_4 , H_2S и др.). Их максимальное содержание приходится на автометаморфическую стадию. Переход к ранней и поздней стадиям метаморфизма сопровождается рядом изменений, связанных со сменой окислительных условий на восстановительные. Флюидный режим постмагматического преобразования, в свою очередь, контролируется температурой: на стадии автометаморфизма он имел окислительный характер, а при снижении температуры (в условиях регионального метаморфизма), сменился на восстановительный. Минералообразование в рудных зонах происходило с участием, главным образом, водноуглекислого флюида при значительной концентрации в нем SO_2 . Состав флюида является определяющим в преобразовании платино-паладиевых сульфидных руд. Анализ результатов физико-химического моделирования сульфидных и сульфидно-силикатных систем позволил установить, что соединения Pt и Pd имеют различные условия равновесия в зависимости от T и P .

Список литературы

1. Зельдович Я.Б. О единственности решения уравнений закона действующих масс // Ж. физ. химии. 1938. Т. 11. Вып. 5. С. 685-687.
2. Каржавин В.К., Вендильо В.П. Термодинамическое равновесие и условия существования углеводородных газов в магматическом процессе // Геохимия. 1970. № 10. С. 1165-1173.
3. White W.B., Jonson S.M., Danzig G.B. Chemical equilibrium in complex mixtures // J. Chem. Phys. 1958. V 28. N 5. P 751-755.
4. Heald E.F., Naughton J.J. Calculation of chemical equilibrium in volcanic system by means of computer // Nature. 1962. V 193. N 4816. P 642-644.
5. Helgeson H.C. Evaluation of irreversible reactions in geochemical processes involving minerals and aqueous solutions. 1. Thermodynamic relations // Geochim. Cosmochim. Acta. 1968. V 32. N 8. P 853-877.
6. Helgeson H.C., Brown T.H., Nigrini A., Jones T.A. Calculation of mass transfer in geochemical processes involving aqueous solutions // Geochim. Cosmochim. Acta. 1970. V 34. N 5. P 569-592.
7. Карпов И.К., Трошина Г.М. Применение линейного программирования для расчёта химических равновесий в минеральных парагенезисах // Докл. АН СССР. 1967. Т. 176. № 3. С. 693-693.

8. Карпов И.К., Казьмин Л.А. Расчёт сложных химических равновесий в поликомпонентных гетерогенных системах в геохимии // Геохимия. 1972. № 4. С. 402-414.
9. Кашик С.А., Карпов И.К. Физико-химическая теория образования зональности в коре выветривания. Новосибирск: Наука, 1978. 152 с.
10. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск: Наука, 1981. 247 с.
11. Минералогический состав пород. Процессы гидратации и окисления внешней оболочки планеты Венера / И.Л. Ходаковский, В.П. Волков, Ю.И. Сидоров, М.В. Борисов // Геохимия. 1978. № 12. С. 1821-1835.
12. Шваров Ю.В. Расчёт равновесного состава в многокомпонентной гетерогенной системе // ДАН СССР. 1976. Т. 229. № 5. С. 1224-1226.
13. Волков В.П., Рузайкин Г.И. Термодинамический расчёт газовых реакций как критерий химического равновесия вулканических эманаций // Вулканизм и глубины Земли. М.: Наука, 1971. С. 344-347.
14. Shimazu Y. Thermodynamical aspects of formation processes of the terrestrial planets and meteorites // Icarus. 1967. V 6. N 2. P 143-174.

КОМБИНАТОРНЫЕ ТИПЫ И ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ ГРАНАТОВ г. КРУГЛАЯ, ЗАПАДНЫЕ КЕЙВЫ, КОЛЬСКИЙ ПОЛУОСТРОВ

М.С. Макаров. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

Понятие реальной кристаллографической простой формы введено Ю.Л. Войтеховским. Это полиэдр, ограниченный хотя бы некоторыми из граней идеальной простой формы, находящимися в стандартной ориентации на произвольном расстоянии от начала координат [1]. Теоретический вывод комбинаторных типов ряда простых форм, в т.ч. и ромбододекаэдра, был первым этапом на пути нового подхода к исследованию кристаллов минералов. Эта работа посвящена изучению кристаллов альмандина, отобранных во время полевой экспедиции 2006 г. на г. Круглая, Западные Кейвы.

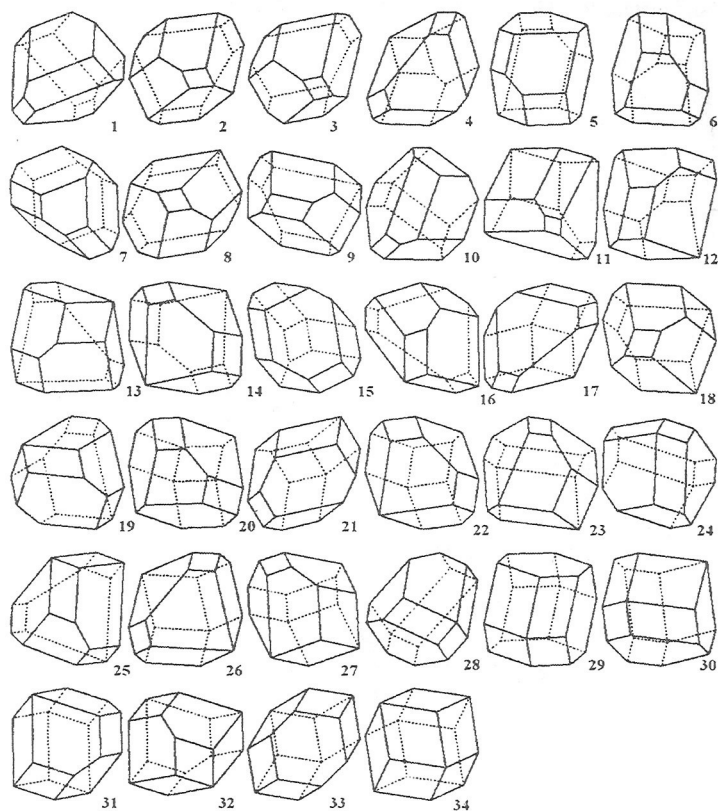


Рис. 1. Полногранные формы реального ромбододекаэдра.

В качестве теоретической основы используются выведенные ранее комбинаторные типы реальных форм ромбододекаэдра. Их 625, из них 34 — полногранные (рис. 1). Анализ реальных простых форм кристаллов альмандина из месторождения г. Макзапахк [2] показал, что большинство кристаллов имеют комбинаторную симметрию $4/m\bar{3}m$ (форма 29 на рис. 1). Сравнительно часты кристаллы с комбинаторной симметрией m , $mm2$ и $m3m$. Этот факт был интерпретирован влиянием диссимметризирующих полей напряжений и потоков вещества. Согласно принципу диссимметрии Кюри, в огранке кристалла сохраняются лишь элементы симметрии, не противоречащие симметрии среды. Иначе говоря, точечная группа симметрии реального кристалла является подгруппой точечной группы симметрии идеальной формы и одновременно — подгруппой группы симметрии среды (т.е. характеризующей ее предельной группы симметрии Кюри).

Кристаллы из обоих месторождений имеют исключительно полногранную форму, если не принимать во внимание частично сколотые и сросшиеся индивиды. Размер кристаллов около 3-4, реже до 10-15 см (рис. 2). Форма кристаллов не всегда изометрична, часто встречаются индивиды, вытянутые вдоль оси 3-го порядка. Проблему при определении реальной формы кристалла представляют плохо различимые ребра и вершины. Гранный набор определяется с большим трудом, т.к. ребра и вершины кристаллов обычно скруглены узкими гранями тетрагон-триоктаэдра.

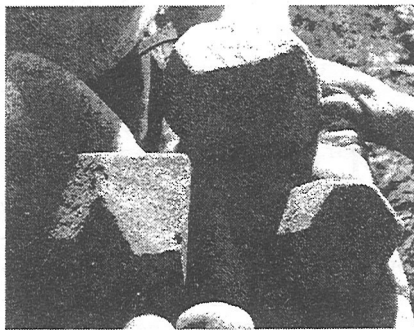


Рис. 2. Кристаллы альмандина г. Круглая.

Автором разработан следующий метод определения реальной формы. Комбинаторный тип ромбододекаэдра записывается в виде схемы, в которой отбрасываются заведомо неинформативные простые вершины и инцидентные им ребра, и оставлялись растянутые в ребра или неизменные непростые вершины.

В схеме выделяются т.н. полюсные и экваторные элементы. Полюсными элементами могут быть две диаметрально противоположные непростые вершины, непростая вершина и диаметрально противоположное ей ребро или два диаметрально противоположных ребра. Экваторные элементы (вертикальное ребро, горизонтальное ребро или непростая вершина) перечисляются по часовой стрелке. На рис. 3 дан пример построения схемы.

При случайном выборе ориентировки одного и того же комбинаторного типа порождаются различные схемы. Такая неоднозначность затрудняет определение формы кристалла. Для сокращения числа схем введены следующие правила построения.

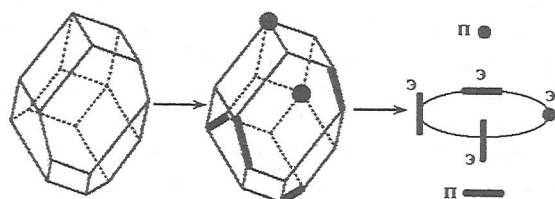


Рис. 3. Пример схемы (п — полюсный, э — экваторный элементы).

Если у кристалла есть две диаметрально противоположные непростые вершины

ны, то они выбираются в качестве полюсных элементов. Если таковых нет, то в качестве полюсных элементов выбирается непростая вершина и диаметрально противоположное ей ребро, расположенное перпендикулярно линии наблюдения. Если на кристалле нет непростых вершин, то берутся два любых ребра, и нижнее располагается перпендикулярно линии наблюдения.

Обход экваторных элементов начинается с элемента отсчета. При этом ориентировка полюсных элементов сохраняется, если среди них есть ребра. Приоритет элементов в порядке убывания следующий: вертикальное ребро → горизонтальное ребро → вершина. Если среди полюсных элементов нет ребер, то элемент отсчета выбирается из четырех экваторных элементов. Если один из полюсных элементов (нижний) — ребро, то выбор осуществляется из двух экваторных элементов, расположенных в плоскостях, параллельных этому ребру.

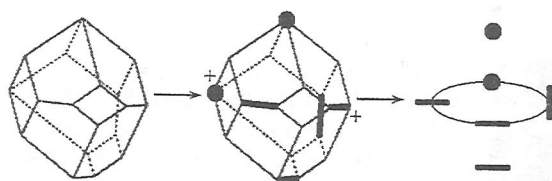


Рис. 4. Выбор элемента отсчета. Пояснения в тексте.

На рис. 4 дана схема с полюсным ребром, поэтому элемент отсчета выбирает-

ся из двух экваторных элементов — горизонтального ребра и вершины (крестики). Выбирается первое как приоритетное. На экваторе есть более приоритетное вертикальное ребро, но оно расположено в плоскости, не параллельной полюсному нижнему ребру и потому не учитывается.

Правила не исключают существования более чем одной схемы для одного кристалла, но в целом уменьшают их число. Преимущества подхода заключаются в простоте конечных данных и легкости сравнения схем. Все ненужные и избыточные элементы реальной формы при этом отбрасываются. Вместе с тем, она может быть легко восстановлена из схемы.

По указанным правилам составляются схемы для всех полногранных форм ромбододекаэдра. Если правила не исключают существования нескольких схем для одной реальной формы, учитываются все из них. При анализе реального кристалла граната выделяются его измененные (растянутые в ребра) или неизмененные непростые вершины. Схема кристалла сопоставляется со схемами теоретических реальных простых форм. Так определяется комбинаторный тип кристалла и точечная группа его видимой симметрии.

Предварительный анализ кристаллов г. Круглой выявил среди них четыре реальные простые формы: $[0804] 4/mmm$, $[048] 4/mmm$, $[084] mm2$, $[0,12] m-3m$ (№№ 29, 14, 31 и 34 на рис. 1, соответственно). Они же в большинстве случаев были ранее найдены на г. Макзапахк. По-видимому, это типичные формы альмандина для месторождений Западных Кейв.

Детальная характеристика форм кристаллов необходима для выяснения условий их образования и роста. В будущем планируется получить более подробную статистику распределения комбинаторных типов в собранной нами обширной коллекции кристаллов из месторождения г. Круглая.

Работа выполнена при поддержке научной школы НШ-1413.2006.5 по Государственному контракту с Федеральным агентством по науке и инновациям № 02.445.11.7403.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Комбинаторная кристалломорфология. Реальные кристаллографические простые формы. Апатиты: Изд-во "К & М", 2004. 275 с.
2. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Морфология кристаллов альмандина месторождения Макзапахк // Матер. XV научн. конф. памяти К.О. Кратца. СПб, 13-16 окт. 2004 г. СПб: Изд-во СПбГУ, 2004. С. 35-37.

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ГИДРО- И КСЕРОГЕЛЕЙ ОКСИГИДРОКСИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В.Н. Наконечный, С.И. Печенюк. Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья КНЦ РАН, Апатиты

Гидрогели оксигидроксидов металлов, осажденные и отмытые в водной суспензии при непрерывном перемешивании в вихревом режиме, существуют в виде частиц с размерами 1-120 мкм в зависимости от природы металла и pH гидрогелей, плотность которых очень мало отличается от плотности воды [3]. Это означает, что изучаемые гели имеют пространственный каркас с чрезвычайно большим объемом полостей. Высушивание гидрогелей позволяет получать твердые тела (ксерогели) с пористостью до 70-80 % и большим объемом пор с радиусами < 25 нм [4]. Как гидро-, так и ксерогели представляют собой наноразмерные системы. Чтобы представить себе их микроструктуру, необходимо знать содержание атомов или молекул в единице объема вещества. Для этого должны быть известны его состав и плотность. К сожалению, именно значения плотностей реже всего встречаются в литературе, особенно для аморфных веществ, в т.ч. гелей. Соответственно, отсутствуют и расчеты, основанные на плотностях.

Ранее мы определили состав ряда гидро- и ксерогелей оксигидроксидов переходных и р-металлов [4,5]. В работе [3] определены плотности свежеприготовленных гидрогелей этих же оксигидроксидов и их дисперсность. На основе полученных данных мы попытались смоделировать микроструктуру гидро- и ксерогелей. Представлены расчеты для гидрогелей Fe(III), Cr(III), In(III), Ti(IV), Zr(IV) и ксерогелей Ti(IV) и Zr(IV). Исходными данными послужили: химический состав, плотность, фракционный состав, кристаллохимические ионные радиусы элементов и удельные поверхности гидрогелей, определенные в [6].

На основе литературных данных [2, 7-9], принято считать, что аморфные оксигидроксиды состоят из полимерных металл-кислородных цепей. Они могут быть расположены в пространстве различным образом: хаотически, в виде глобул и трехмерного сетчатого каркаса, который содержит всю массу геля. Такие примеры известны для других полимеров: полиэтилена, полипропилена; молекулы третичных белков; свежеполученного силикагеля. Методом математического моделирования мы попытались определить, к какому типу принадлежат изучаемые гидро- и ксерогели.

Для моделирования микроструктуры гидрогелей использованы данные седиментационного анализа. Рассчитывали суммарный объем определенного ко-

личества гидрогеля (0,01 моль), затем выбирали фракции геля, содержащие 10-20 % (Q) от всей массы. Зная средний эквивалентный радиус частиц данной фракции ($r_{\text{част.}}$), вычисляли средний объем частицы ($V_{\text{част.}}$) и число частиц во фракции ($N_{\text{част.}}$). Определяли размер звена металл-кислородной цепи ($L_{\text{звена}}$) и ее длину ($L_{\text{цепи}}$), а также диаметр цепи (d), используя значения кристаллохимических радиусов катиона металла, кислорода и гидроксильной группы [1]. Предполагая, что дисперсная частица состоит из сплошной металл-кислородной цепи, вычисляли ее поверхность ($S_{\text{цепи}}$) как поверхность цилиндра (рис. 1). Соединение структурных единиц – через общую гидроксильную группу; зигзагообразной формой цепи пренебрегали. Вычисляли суммарную поверхность всех частиц фракции ($S_{\text{фр}}$) и сравнивали ее с величинами удельной поверхности ($S_{\text{фрэксп}}$, табл. 2), измеренной методом адсорбции гидроксильных групп [6]. Результаты расчета даны в табл. 1.

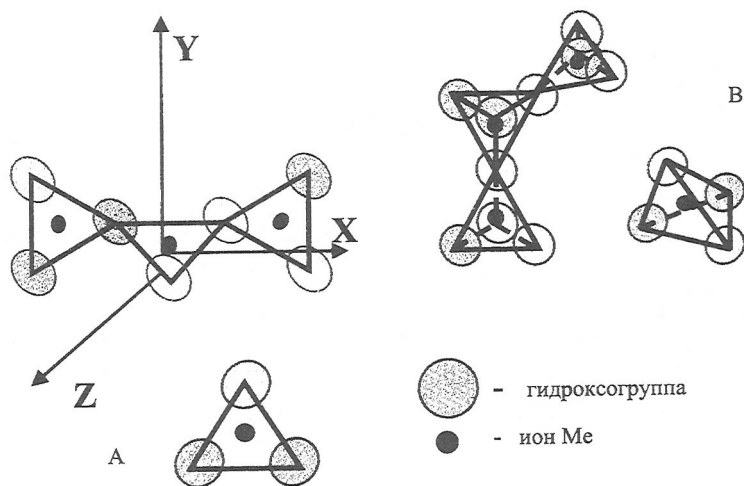


Рис. 1. Схематическое изображение металл-кислородных цепей, содержащих Me (III) (А) и Me (IV) (В). Структурные единицы: А — треугольник, В — тетраэдр.

Полученные расчетные величины превышают экспериментальные в 10-40 раз. Следовательно, дисперсные частицы не могут представлять собой глобулы из непрерывной цепи и, скорее всего, обладают трехмерной сетчатой структурой, в которой имеется ряд узловых ионов металла, не связанных с функциональными ОН-группами (рис. 2). Узловые ионы должны быть исключены из числа ионов, образующих сорбционные центры. Если принять в качестве простейшей модели, что каркас имеет кубическую ячейку, то каждый ион металла, находящийся в вершине куба, является общим с 8 другими соседними ячейками. Если число ячеек в каркасе равно n , то из числа ионов,

образующих сорбционные центры, нужно вычесть 8п. Можно приблизительно рассчитать параметры кубической ячейки. Если поверхность фракции гидрогеля с $r_{\text{част}} = 26$ мкм равна 335 м^2 , то поверхность одной частицы во фракции будет равна $6.06 \times 10^{-6} \text{ м}^2$. Суммарная длина всех звеньев, создающих поверхность, равна $2.61 \times 10^3 \text{ м}$, а число звеньев – 6.07×10^{12} . Разница между общим числом звеньев и числом звеньев, создающих поверхность, равна 3.22×10^{13} , отсюда $n = 4.03 \times 10^{12}$. Если все кубические ячейки составляют большой куб, то его ребро содержит 1.6×10^4 , а 6 граней куба – 1.52×10^9 ячеек. Если между узловыми ионами хрома располагается 5-10 промежуточных, то будет использовано не более 1.52×10^{10} , т.е. $\sim 0.25 \%$ всех звеньев, создающих поверхность. Следовательно, в образовании измеримой поверхности должны участвовать и ячейки каркаса гидрогеля в количестве ~ 50 слоев от поверхности. Аналогичные расчеты см. в табл. 2.

Таблица 1. Расчет поверхности гидрогелей для глобулярной структуры.

Ц.и. ОГ	pH	№ фр.	Qфр	$r_{\text{част}} \cdot 10^5$ м	$V_{\text{част}} \cdot 10^{14}$ м ³	$N_{\text{част}} \cdot 10^{-6}$	$N_{\text{зв.}} \cdot 10^{-14}$	$L_{\text{звена}} \cdot 10^3$ нм	$d_{\text{звена}} \cdot 10^3$ нм	$L_{\text{сцеп}} \cdot 10^{-4}$ м	$S_{\text{сцеп}} \cdot 10^4$ м ²	$S_{\text{фр}} \cdot 10^3$ м ²
Cr	9	2	0,35	2,6	7,4	55,3	0,38	0,43	0,74	1,66	0,39	2126
Fe	9	2	0,28	6,1	95,0	4,3	3,95	0,44	0,75	17,4	4,08	1738
		3	0,15	5,2	58,9	3,7	2,45			10,8	2,52	931
In	9	2	0,11	6,8	132,0	1,8	3,75	0,49	0,80	18,4	4,59	811
		3	0,23	5,5	69,7	7,0	1,98			9,71	2,43	1697
Ti	8	2	0,07	5,6	73,5	1,5	2,89	0,43	0,74	12,60	2,92	425
		3	0,16	4,5	38,2	6,4	1,50			6,52	1,51	972
Zr	8	2	0,25	6,3	105,0	6,0	2,53	0,47	0,78	11,9	2,89	1724
		3	0,09	4,5	36,9	6,1	0,89			4,19	1,02	621

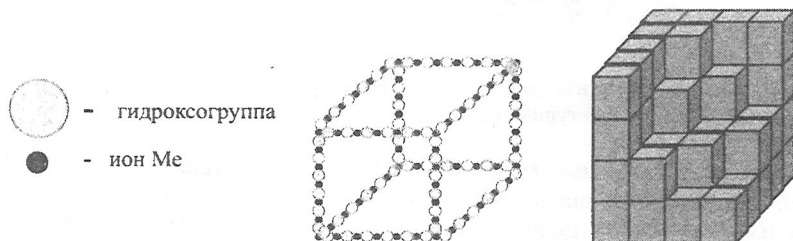


Рис. 2. Схема пространственного каркаса гидрогелей.

Считая, что содержащаяся в гидрогелях вода заключена в гидратных оболочках звеньев металл-кислородной цепи, мы рассчитали емкость гидратных оболочек и молярный объем гидрогелей для их сравнения с эксперименталь-

ными (табл. 3). Сложением кристаллохимических радиусов элементов определены эффективные радиусы ($r_{эф.М}$) негидратированных звеньев как сфер, в которые вписаны треугольные и тетраэдрические молекулы, гидроксильные группы которых находятся на поверхности сферы, в центре которой находится ион металла. Сферы соединяются друг с другом через гидроксильные группы (рис. 1). Затем вычислены эффективные радиусы первой и второй гидратных оболочек ($r_{ф1}$ и $r_{ф2}$). С использованием этих радиусов вычислены объемы (V_m , V_1 и V_2) негидратированных звеньев и первой и второй гидратных оболочек. Используя молекулярный объем воды (3×10^{-23} см³), рассчитаны количество молекул воды в первой (n_1) и второй (n_2) оболочках. Суммы $n_1 + n_2$ очень близки (в пределах $\pm 10\%$) к экспериментально определенным [5]. С использованием радиусов гидратированного звена ($r_{гм}$) рассчитаны молекулярные ($V_{гм}$) и молярные объемы (V) гидрогелей. Расчетные и экспериментальные величины сходятся с точностью до $\pm (3-8)\%$.

Таблица 2. Параметры трехмерной решетки гидрогелей.

Ц.и. ОГ	pHос	№ фр	$S_{фр.}$ эксп., м ²	$S_{част.}$, м ² $\times 10^5$	$L_{зв.}$ м $\times 10^{-3}$	$N_{зв.}$ $\times 10^{-13}$	$n_{куб.}$ ячеек $\times 10^{-13}$	n ячеек в ребре куба $\times 10^{-4}$	n ячеек на 6 гра- нях куба $\times 10^{-9}$
Cr	9	2	335	0,61	2,61	0,60	0,40	1,59	1,52
Fe	9	2	175	4,11	17,5	3,99	4,44	3,54	7,53
		3	94	2,55	10,9	2,47	2,75	3,02	5,47
In	9	2	44	2,48	9,92	2,02	4,43	3,54	7,51
		3	92	1,31	5,25	1,07	2,34	2,86	4,91
Zr	8	2	167	2,80	11,5	2,45	8,85	3,06	5,60
		3	60	0,99	4,05	0,86	1,01	2,16	2,79

Таблица 3. Емкости гидратных оболочек и молярные объемы гидрогелей.

Ц.и. ОГ	pH	$r_{эф.М.}$ нм	$r_{эф1.}$ нм	$r_{эф2.}$ нм	$V_{m.}$ нм ³	$V_{1.}$ нм ³	$V_{2.}$ нм ³	n_1	n_2	$r_{гм.}$ нм	$V_{гм.}$ нм ³ $\times 10^{-6}$	V 0.01 моль, см ³	
												расч.	эксп.
Cr	9	.37	.65	.92	.21	1,13	3,28	31	72	1,04	1,88	11,34	11,62
Fe	9	.37	.65	.93	.22	1,14	3,31	31	73	1,16	2,33	14,04	14,48
In	9	.40	.67	.95	.26	1,28	3,59	34	77	1,40	3,44	20,70	21,16
Ti	8	.37	.65	.92	.21	1,13	3,28	31	72	1,18	2,42	14,58	15,30
Zr	8	.39	.66	.94	.24	1,23	3,48	33	75	1,48	3,83	23,04	24,95

Используя плотности ксерогелей оксигидроксидов Ti и Zr, рассчитаны объемы свободного пространства в веществе ксерогелей без учета объема пор (табл. 4). Определялись объемы, занимаемые каждым из составляющих элементов, и их суммы (V_{Σ}). Полученное пространство соответствует объему двух (Ti) или четырех (Zr) моль воды / моль ксерогеля. Следовательно, в со-

став высушенных на воздухе ксерогелей не может входить более этого количества воды (поры ксерогелей заполнены воздухом). Таким образом, модельные расчеты микроструктуры гидро- и ксерогелей показали хорошее согласие с экспериментальными данными. Это подтверждает обоснованность принятых при расчетах допущений.

Таблица 4. Расчет объема свободного пространства в ксерогелях.

Формула ксерогеля	Плотность г/см ³	М г/моль	Моль/см ³	V _з см ³ /см ³	V _{св} см ³ /см ³
TiO _{0,5} (OH) ₃	1,64	106,9	0,0153	0,474	0,526
ZrO _{0,5} (OH) ₃	1,39	150,2	0,0093	0,294	0,706

Список литературы

1. Ефимов А.И., Белорукова Л.П., Василькова И.В., Чечев В.П. Свойства неорганических соединений. Справочник. Л.: Химия, 1983. 390 с.
2. Неймарк И.Е. Основные факторы, влияющие на пористую структуру гидроксидных и окисных адсорбентов // Коллоид. журн. 1982. Т. 44, № 4. С. 780-783.
3. Печенюк С.И., Домонов Д.П., Наконечный В.Н. Определение размеров частиц в водных суспензиях гидрогелей оксигидроксидов железа (III), индия (III), алюминия, хрома (III), титана (IV) и циркония (IV) // Изв. РАН. Сер. хим. 2005. № 5. С. 1083-1088.
4. Печенюк С.И., Иванов Ю.В., Семушина Ю.П. Пористость некоторых ксерогелей оксигидроксидов железа (III), хрома (III) и циркония (IV) // Журн. неорг. химии. 2006. Т. 51, № 2. С. 233-236.
5. Печенюк С.И., Кузьмич Л.Ф. Изменение состава гидрогелей оксигидроксидов металлов в растворах электролитов // Журн. неорг. химии. 2000. Т. 45. № 9. С. 1462-1467.
6. Печенюк С.И., Матвеев С.И., Семушин В.В. Оценка удельной поверхности оксигидроксидов по величинам адсорбции OH-групп // Изв. РАН. Сер. хим. 2001. Вып. 9. С. 1505-1511.
7. Avena M.J., Giacomelli C.E., de Pauli C.P. Formation of Cr (III) hydroxides from Chrome Alum solutions. I. Precipitation of active Chromium Hydroxide // J. Coll. Int. Sci. 1996. V 180. N 2. P 428-435.
8. Giacomelli C.E., Avena M.J., Camara O.R., de Pauli C.P. Some physicochemical properties of the chromium (III) hydrous oxide-aqueous solution interface // J. Coll. Int. Sci. 1995. V 182, N 1. P 249-253.
9. Livage J., Henry M., Sanchez C. Sol-gel chemistry of transition metal oxides // Prog. Solid St. Chem. 1988. V 18. P 259-341.

СТРУКТУРА ГОРНОЙ ПОРОДЫ: ОПЫТ ФОРМАЛИЗАЦИИ

Ю.А.Ткачев. Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар

Структура – свойство, характеризующее *систему*. В свою очередь, система – совокупность *элементов* некоторой природы, связанных в рамках этой системы определенными *отношениями*. Элемент – *объект, процесс*, любое другое явление природы или какой-либо области человеческой деятельности, которые можно рассматривать как нечто единичное – неделимое. Под такое определение попадают структуры самых разнообразных систем, например, архитектурная структура города, структура министерства, экспозиционная структура музея, наконец, структура горной породы, структура аллювиальных отложений реки умеренного климата и необозримое множество других структур самых различных систем. Разные аспекты какой-либо системы могут характеризоваться самостоятельными структурами. Так, город как систему можно охарактеризовать структурой зданий и сооружений, структурой дорог, производственной структурой города, управленческой и т.д.

Система вместе со своей структурой существует в некотором *пространстве*. Дать общее определение пространства мы затрудняемся, заметим лишь, что оно может быть абстрактным или конкретным – физическим. Как мы предполагаем, разные структуры разных систем существуют и требуют для своего описания пространств определенной *размерности* и *метрики*. Например, структура горной породы (как и сама порода) существует в физическом трехмерном пространстве. Относительно его метрики можно заметить следующее. Если задаться условием, чтобы описание структуры включало геометрические размеры элементов системы (ингредиентов горной породы), то для этого потребуется евклидово пространство. Для более общего описания можно ограничиться более простой метрикой [2, 3, 5]. Вообще, простые метрики подходят для описания фундаментальных свойств структур, которые инвариантны относительно некоторых определяемых исследователем параметров. Мелкозернистые и крупнозернистые граниты, отличающиеся только размером зерен, будут в этом пространстве неразличимы – характеризоваться одинаковыми структурами.

Цели описания структуры горной породы могут быть различными, например, выяснение условий её образования, механизма кристаллизации (для магматических пород), ландшафтных и/или физико-химических условий накопления осадков (для осадочных пород). Одна из важных практических целей заключается в *диагностике породы*, которая не может быть достоверной без идентификации её структуры в терминах некоторой (заранее определенной) классификации. Наиболее подробной структурной характеристики требует мате-

матическое и компьютерное моделирование горной породы для решения специальных задач.

Таким образом, в зависимости от целей изучения структуры, последняя может быть описана с большей или меньшей полнотой, включать или игнорировать некоторые отношения между элементами. Особого внимания заслуживает *максимально полное описание структуры*. Оно позволит создавать компьютерные модели горной породы, статистически не отличимые от реальной породы – прототипа. Статистическая неотличимость означает, что ни при каком количестве реальных и модельных образцов гипотеза идентичности структур реальной горной породы и её модели не отклоняется. (Следует уточнить, что можно создать слепок образца горной породы, рисунок её шлифа, которые будут физически совпадать с оригиналом. Такие модели мы не имеем в виду и даже не называем моделями).

Анализ структуры какой-либо системы можно начать с выделения *классов её элементов*. В случае горной породы таковыми являются **минеральные виды**. Классы элементов должны принадлежать к *одному иерархическому уровню строения* – горнопородному, занимающему среди других следующее положение: атомный → молекулярный → минеральный → **горнопородный** → геологических тел → геологических формаций → геосферный → планетарный. Каждый класс элементов определенного иерархического уровня является системой более глубокого уровня. Обычно выделение классов элементов не составляет проблемы, причем несущественные редкие классы могут быть опущены. Никакой класс элементов не должен содержать ассоциаций (групп в быденном понимании) классов или экземпляров других элементов, иначе будет нарушен принцип единства иерархического уровня: группы элементов данного уровня, если они действительно выделяются, должны относиться к элементам следующего (более макроскопического) уровня.

В связи с этим коснёмся вопроса о *текстуре*. При описании горной породы геологи различают структуру и текстуру. Точного определения, что считать структурой, а что – текстурой, нет. На наш взгляд, *текстура – это структура на более высоком иерархическом уровне строения горной породы*. Элементами здесь выступают статистически различимые участки породы, состоящие из *множеств зерен минеральных видов*. В полосчатой текстуре элементами ее являются участки в виде слоев, дающих в сечениях полосы. В порфирообластовой текстуре элементами являются крупные минеральные выделения и им противопоставляется мелкокристаллическая “основная масса”. Признавая реальность существования текстур как структур более высокого иерархического уровня, мы тем самым можем предполагать существование и некоего надпородного уровня строения в геологии, промежуточного между горнопородным и уровнем геологических тел.

После выделения классов элементов для структурной характеристики необходимо установить перечень интересующих исследователя *отношений* между элементами. Это наиболее проблематичная часть работы. В приложении к горной породе самым важным отношением является факт контакта зерен одного минерального вида с зернами этого же и других минеральных видов. Не вызывает сомнений, что описание структуры горной породы должно включать *координационное число для каждого элемента* (минерального вида), т.е. число зерен тех же или других минеральных видов, находящихся в контакте с зерном рассматриваемого минерального вида. В отличие от кристаллической решетки, где для каждого вида атома (иона) существует вполне определенное координационное число, в структуре горной породы *координационное число (КЧ) является величиной случайной* с распределением, которое непросто изучить. Пока в распоряжении исследователей будут иметься только плоские срезы (шлифы, аншлифы, полировки) мы будем иметь только “плоскостные” (двумерные) КЧ, изученные в сечениях. Для более тонкой структурной характеристики потребуются, вероятно, “вторые” КЧ (второго слоя окружения минеральных зерен, контакты через посредство третьих зерен). Важен вопрос, учитывать ли контакты зерен по ребрам и вершинам при определении координационных чисел. Если в плоских срезах вероятность обнаружения контактов вершинами нулевая, а ребрами (ребро контактирует с ребром) — очень мала, то при объемном изучении они могут появиться в изобилии. Настоящей проблемой является восстановление распределения “объемных” координационных чисел по таковым в плоских срезах.

Очень важной структурной характеристикой горной породы являются *топологические свойства* пространства, занимаемого каким-либо минеральным видом или группой минеральных видов, в частности, его *связность*. Очевидно, что области пространства, занимаемые отдельными зернами, являются односвязными. Мономинеральная порода также является односвязной. В полиминеральной породе могут появиться односвязные, многосвязные или несвязные мономинеральные области. Пространство породы, состоящей из однородной “основной массы” с порфиристыми выделениями какого-либо минерала, состоит из односвязной области первой и несвязных “однозерновых” областей второго.

Считая породу объектом статистической природы, полезно обсудить вопрос о *распределении* несвязных, многосвязных и односвязных областей *по числу зерен* для каждого минерального вида. Нам представляется, что *успехи в расшифровке механизма образования горной породы будут связаны с расшифровкой её топологии в упомянутом выше смысле*. Эта область совершенно не тронута. Не могу не упомянуть высказывание полувековой давности своего учителя О.В. Плышевского, который утверждал, что “весь кварц в

метасоматическом граните представляет собой единое пространство". Очень важным практическим вопросом для нефтегазовой геологии и гидрогеологии является топология порового пространства [1, 4].

Обязательными атрибутами структуры горной породы являются распределение зерен каждого минерального вида по размерам и их ориентировка. Для магматической горной породы последняя выразится в распределении направлений кристаллографических осей, для осадочной обломочной – в распределении осей вытянутости обломков. Ещё одной важной статистической характеристикой породы являются вероятности контактов различных минеральных видов, которые традиционно выражаются *матрицей переходных вероятностей* (контакта зерна одного минерального вида с другим). При более подробной структурной характеристике может потребоваться матрица вероятностей пар или троек переходов.

Одним из важных методов изучения горной породы является компьютерное моделирование. Именно по этой причине формальное описание структуры должно обеспечить построение такой модели. Большинство атрибутов структуры явно или неявно связаны друг с другом. Одни могут быть заданы независимо, другие сильно ограничены в своих значениях уже заданными, третьи однозначно предопределены первыми двумя. В этой не исследованной области многое неясно. Наш опыт моделирования показал, что определенные структурные характеристики *непосредственно* используются при моделировании, например, определяющие координаты центров зерен (центров кристаллизации). Они являются *конструктивными*. Другие можно установить лишь апостериорно, после создания модели, например, координационные числа, которые определяются координатами центров зерен и их сравнительными размерами. Это – *пассивные* структурные характеристики. Выясняется, что попытки сконструировать породу по заданной структуре могут не увенчаться успехом из-за противоречий в ее описании. Таким образом, если структура задается априори или выявляется наблюдениями по выборкам (с погрешностями), то она может оказаться противоречивой, и выяснение сути этой противоречивости представляет собой сложную проблему.

Выясняется также, что для моделирования структуры необходима хотя бы общая схема образования горной породы, имитирующая реальные механизмы её образования в природе, которые мы не всегда знаем. Эвристическая сила моделирования заключается и в том, чтобы варьировать механизмы моделирования породы и результаты моделирования сравнивать с природными образцами. Поиск механизма компьютерной реализации структуры одновременно есть изучение связи между условиями образования породы и её структурой.

Для краткого описания структуры замечательно подходят такие элементы языка программирования, как *запись* или *объект*. Сидя на вокзалах и в аэропортах, я часто занимаю свои мысли изучением структуры каменной облицовки полов. Существует дешевая облицовка, которая выглядит следующим образом. Площадь пола разделена на прямоугольники значительного размера (со сторонами до 2-3 м). В их пределах в бетонную основную массу вплотную вставлены плоские обломки мраморной, гранитной и другой плитки, причем одна-две стороны обломка прямолинейны, остальные сколоты случайно. После застывания бетона вся поверхность подвергается шлифовке и полировке.

Невольно возникает гипотеза о “генезисе” каменной облицовки пола, т.е. *как она создавалась*. Первый вопрос – зачем площадь разделялась брусками на прямоугольники. Предположение: чтобы заливать бетон в отдельные прямоугольники, выравнивать их по уровню (бруски устанавливают именно по уровню) и чтобы рабочим можно было ходить по мосткам (доскам), проложенным от бруска до бруска, наконец, чтобы использовать привозимую на один рабочий день порцию бетона в отдельном прямоугольнике или в нескольких без остатка, чтобы он не застыл. Наблюдения показывают, что прямоугольники не образуют правильной сетки, что в одной вершине сходятся преимущественно три стороны (как это получалось бы при случайном приращении прямоугольников разного размера), но иногда сходятся и четыре.

Таким образом, выясняется, что бруски для разбиения площади пола специально для данного помещения не готовились, а употреблялись те, что остались от других работ, без особой сортировки. На этом анализ структуры на “верхнем” уровне заканчивается, остается описать её количественно (установить средние размеры сторон, их среднеквадратические отклонения, соотношение вершин с тремя и четырьмя сторонами, проверить некоторые статистические гипотезы), что в данном случае вряд ли изменит “генетические” выводы о технологии процесса.

Не менее интересен анализ структуры следующего, более глубокого уровня – расположения плиток в прямоугольниках. Первый вопрос (опять он порождается стремлением установить генезис!) – брались ли плитки из кучи случайно, т.е. всегда ли бралась верхняя плитка кучи, или они подбирались по типам пород (мрамор, гранит, гнейс, габбро и т.д.), чтобы создать какую-либо закономерную мозаику. Устанавливаем число типов пород плиток. Пусть их только два – мрамор и гранит. Устанавливаем частоту ближайшего соседства типов, т.е. оцениваем “переходные вероятности”: мрамор/мрамор, мрамор/гранит, гранит/гранит. Проверяем статистическую гипотезу о случайном характере соседства. Гипотеза отклоняется в пользу альтернативы – каменщик по мере возможности чередовал плитки. Но... в некоторых прямоугольниках у какой-нибудь его стороны скапливались только мраморные плитки:

их в общей массе насчитывалось примерно вдвое больше. Очевидно, каменщик не утруждал себя подсчётом соотношения типов. И правильно делал, т.к. это потребовало бы бесконечного копания в куче плиток, т.е. существенных затрат времени.

Второй вопрос касается *ориентации плиток*. Большое их число имело прямолинейную (обпиленную) сторону, а то и две (в редких случаях – даже три!). Бросается в глаза, что первый от разделяющего бруска ряд плиток почти всегда имеет прямолинейную сторону, ориентированную параллельно бруску (гипотезы об их случайном выборе для первого ряда и случайном расположении отклоняются на высоком уровне значимости!). Начиная со второго, ряды можно наметить весьма приблизительно. И только через 50–70 см шеренги плиток подравниваются. Вероятно, это связано с очередной перестановкой досок-мостков, на которых сидит каменщик. Если он перед перестановкой мостков не заполнит плитками и не выровняет отработанную площадь, то со следующих мостков ему будет трудно дотянуться до предыдущей *полосы*. Если она хорошо выровнена, то иногда видно, что первый ряд следующей полосы устроен так, как первый ряд у бруска – состоит из плиток с прямолинейной стороной, ориентированной параллельно “фронту работ”. В целом же плитки обколотой формы размещены так, чтобы выпуклости одной входили в вогнутости другой – насколько это позволяет форма плиток, при этом в образующиеся “дыры” между ними вставляются обломки меньшего размера. *Этот неформальный анализ показывает, что каменщик пытается реализовать идею плотнейшей упаковки обломков.*

Проверить или даже сформулировать на логико-математическом языке гипотезу, что это действительно так, сложно. Но с помощью компьютерного моделирования на очень быстродействующей машине можно смоделировать, используя формы всех плиток кучи, какое угодно число прямоугольников, подсчитать отношение площадей бетон/плитка, построить кривую распределения и найти вероятность того, что показатель меньше или равен измеренному на изучаемом полу. Если эта вероятность достаточно мала, гипотезу о случайной ориентации плиток придется отклонить, тем самым признавая, что каменщик подбирал плитки и ориентировал их сознательно “под идею”. Изложенные *вокзальные наблюдения*, требующие знания лишь простых сторон жизни, иллюстрируют основные понятия структуры и их разнообразные приложения. Записав основные параметры структуры, мы можем её смоделировать. Если имеется несколько объектов с похожими структурами, мы можем проверить гипотезы об их идентичности. Наконец, мы можем идентифицировать каменщика, следующего в своей работе принципам, не всегда осознаваемым им явно.

Догадливый читатель без труда перейдет от структур вокзальных полов к петрографическим структурам, порождаемым различными процессами минерало-, рудо- и петрогенеза.

Список литературы

1. Амосова О.Е. Компьютерное моделирование структуры и порового пространства терригенных осадков: Автореф. дисс. к.г.-м.н. Сыктывкар, 2000. 19 с.
2. Войтеховский Ю.Л. Петрографические метафоры // Урал. геол. журнал. 2002. № 1 (25). С. 21-100.
3. Войтеховский Ю.Л. Горная порода как пространство – определение понятий // Тр. Всерос. научн. школы “Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии”. Апатиты, 3-7 окт. 2005 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2005. С. 154-182.
4. Ткачев Ю.А., Амосова О.Е. Терригенный осадок ... с изнанки // Вестник ИГ Коми НЦ УрО РАН. 1999. № 2. С. 3-5.
5. Voytekhoysky Y.L., Fishman M.A. Rock kriging with the microscope // Math. Geol. 2003. V 35. N 4. P 451-458.

СВЯЗНОСТЬ ЭЛЕМЕНТОВ СТРУКТУРЫ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ, ИХ ПРОЧНОСТНЫЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА

**В.Ю. Траскин, Я.В. Кучериненко, Ф.А. Куликов-Костюшко,
З.Н. Скворцова. МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва**

Представление пен, поликристаллических материалов и горных пород полиэдрическими структурами, заполняющими пространство, восходит к работам Кельвина и Коксетера [9-11]. Следуя традиции, можно связать свойства минеральных полиэдров, соответствующих индивидуальным кристаллическим зёрнам, с мезо- и макроскопическими прочностными, реологическими и транспортными характеристиками минеральных агрегатов и породы в целом. Для этого необходимо включить в рассмотрение внутренние поверхности раздела, из которых наиболее универсальными являются границы, разделяющие зерна одинаковых или разных минералов. Изучению межзеренных границ в материалах различной природы посвящено большое число статей и монографий. В частности, роль их физических и химических свойств в онтогении минеральных индивидов и агрегатов детально рассмотрена в [2]. Вместе с тем, межзеренным границам как самостоятельным структурным единицам ансамблей особого рода – граничных сетей – уделялось гораздо меньше внимания, хотя конструктивность такого подхода не вызывает сомнений [12, 14]. В данной работе предлагается модель, основанная на этих представлениях, и обсуждаются возможности ее экспериментальной проверки.

Ключевым параметром, характеризующим границу раздела фаз, является ее удельная поверхностная свободная энергия σ . Избыток свободной энергии, связанный с развитой внутренней поверхностью поликристаллических агрегатов и придающий им принципиальную термодинамическую неустойчивость, определяет маршруты массопереноса (диффузии или перемещения жидкой фазы) и пути распространения трещин разрушения или пластического сдвига в случаях, когда внутренние границы ослаблены по сравнению с объемом зерен. При этом существенной особенностью поликристаллов, отличающей их от стереологически сходных объектов – пен и спумоидных эмульсий – является различие значений σ для разных межзеренных границ даже в мономинеральных агрегатах, т.к. соседние зерна практически всегда разориентированы по-разному. Высокоэнергетические границы, обычно разделяющие сильно разориентированные зерна, вносят более заметный вклад в свойства агрегатов, чем низкоэнергетические. Следовательно, ансамбль границ представляет собой множество контактирующих между собой элементов, определенным образом расположенных в пространстве и обладающих неким свойством (свободной энергией и зависящими от нее параметрами), стохастически варьирующим от элемента к элементу. Поэтому для решения вопроса

о соотношении индивидуальных свойств элемента и коллективных характеристик ансамбля можно привлечь теорию перколяции и связанное с ней учение о фракталах.

Применение теории перколяции позволяет оценить степень связности выделенных элементов (высокоэнергетических границ зерен), которые могут образовывать бесконечный кластер (при превышении некоторой критической концентрации таких элементов – порога перколяции) или распределяться по кластерам конечного размера. Последовательность действий, направленных на получение необходимой информации, можно представить в виде алгоритма исследования “идеализированного поликристалла” – агрегата полиэдров, необходимым свойством которого является стохастическое распределение по границам значений межзеренной энергии (рис. 1).



Рис. 1. Схема последовательного описания межзеренных границ.

1. Непосредственное измерение энергии межзеренных границ σ (ГЗ) в реальных поликристаллических материалах сопряжено с значительными экспериментальными трудностями. Но могут быть полезны даже относительные значения этих величин, получаемые из уравнений трехфазного равновесия, таких как уравнение Херринга в его упрощенной форме, без учета торсионных членов, т.е. в предположении о независимости энергии межзеренной границы от ее ориентации [3]: $\sigma_1/\sin \alpha_1 = \sigma_2/\sin \alpha_2 = \sigma_3/\sin \alpha_3$, где σ_i – энергии межзеренных границ, α_i – противолежащие им двугранные углы, которые могут быть экспериментально измерены. В редких случаях, когда точно известна зависимость энергии межзеренной границы от разориентировки соседних зерен, первым шагом может быть также определение ориентировок зерен.

2. Экспериментальное измерение достаточного количества двугранных углов в поликристаллическом образце позволяет найти характер распределения значений межзеренной энергии и его относительную ширину (отношение

стандартного отклонения к математическому ожиданию) [6]. Для NaCl, KCl, Zn, Al и CaCO₃ распределение близко к нормальному.

3. Для построения межзеренного энергетического спектра в реальной физической шкале (Дж/м²) необходимо знать среднее значение межзеренной энергии $\langle \sigma \text{ (ГЗ)} \rangle$, которое для неметаллических материалов приблизительно равно 1/3 удельной свободной энергии поверхности. Кроме того, для оценки степени связности высокоэнергетических границ нужно определить пороговое значение $\sigma^*(\text{ГЗ})$, выше которого граница считается высокоэнергетической (положение этого порога зависит от физической сути задачи, являющейся конечной целью всей процедуры).

4. Доля высокоэнергетических границ определяется как площадь под гауссианой или иной кривой распределения межзеренных энергий, лежащая правее точки $\sigma^*(\text{ГЗ})$.

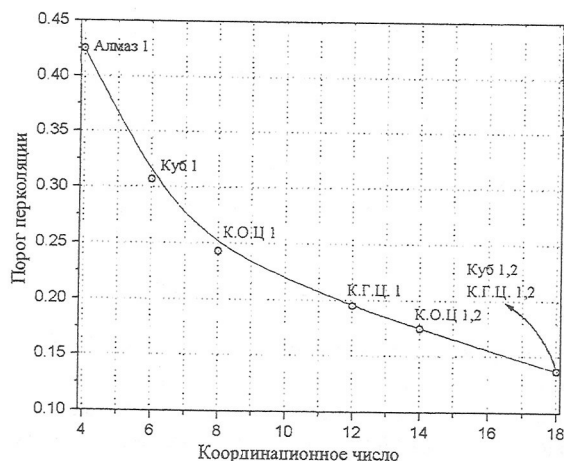


Рис. 2. Определение порога перколяции для поликристаллической системы. Использованы литературные значения порогов перколяции регулярных решеток с учетом первой (1) или первой и второй (1, 2) координационных сфер [5, 8].

5. Чтобы применить аппарат теории перколяции, нужно знать координационное число Z межзеренных границ. С учетом того, что каждая граница контак-

тирует с двумя другими по ребру, в трехмерной задаче Z равно удвоенному числу сторон n грани полиэдра, которое в реальных поликристаллах и пенах в среднем близко к 5 (5.08 для идеальной формы равновесного зерна — ячейки Кокстера). Если каждая граница контактирует с двумя другими по одному ребру и еще с одной через каждую из вершин, Z может быть выражено как $3n$. Для квазидвумерного случая (для крупнозернистой фольги, зерна в которой проходят через всю толщину) $Z = 4$ независимо от формы зерен.

6. Для нахождения порога перколяции p_c могут быть использованы известные значения порогов для регулярных решеток [5, 8], определенные для двух разных перколяционных задач (для узлов и связей). Двумерная задача для фоль-

ги совпадает с задачей связей на сотовой решетке, а порог перколяции равен 0.59. В трехмерном случае имеем дело с задачей узлов на решетке с переменным координационным числом, варьирующим в интервале 10-11 или 15-16, если возможна связность через вершины. Оценку порога можно выполнить, если рассмотреть зависимость $p_c(Z)$, которую легко построить по литературным данным (рис. 2). Монотонный и пологий характер убывания p_c с возрастанием Z позволяет оценить порог как 0.20 ± 0.05 .

Сетка ребер (тройных стыков граней) в трехмерном случае представляет собой хорошо определенную задачу связей на решетке алмаза с порогом перколяции 0.39. Понятие о "характеристической свободной энергии" σ_x ребра и вершины полиэдра и метод расчета энергетического спектра ребер и вершин на основе распределения $\sigma(TЗ)$ даны в [1]. Примеры кривых, рассчитанных на основе нормально распределенных межзеренных энергий, приведены на рис. 3.

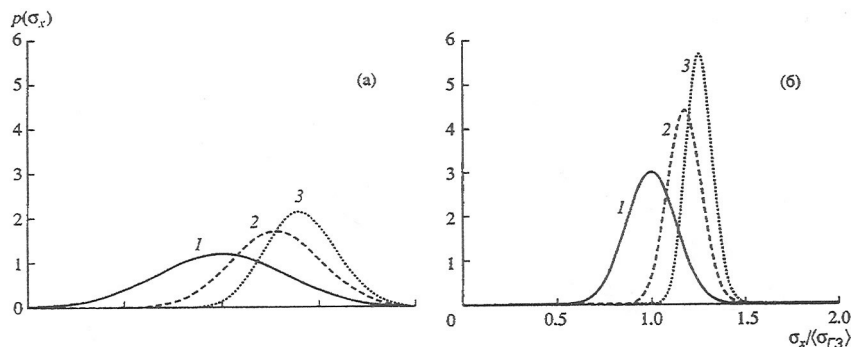


Рис. 3. Энергетические спектры плоскостей границ зёрен (1), тройных стыков (2) и вершин (3), вычисленные для спектров межзёренных энергий с относительной шириной $w = 0.333$ (а) и 0.133 (б).

Неожиданный вывод из предложенной схемы состоит в том, что при всей нестрогости допущений перколяционные параметры систем лежат в узком интервале или имеют точное значение. Возвращаясь к примеру металлической фольги, можно утверждать, что пройти на сколь угодно далекое расстояние, не покидая высокоэнергетических границ, возможно только в случае, если таковыми считаются границы, содержание которых не ниже 59 %. Это справедливо при любом разбросе форм и размеров зерен и при любом виде и ширине распределения межзеренных энергий. В более важном случае трехмерного полиэдрического агрегата для построения бесконечного кластера достаточно лишь верхних 20 % границ.

7. Для прогнозирования физических свойств агрегатов ключевое значение имеет природа процессов, для которых величина $\sigma^*(ГЗ)$ является пороговой. Наиболее яркой, но не единственной иллюстрацией служит межзеренное смачивание, сопровождающееся образованием и распространением прослоек флюидной фазы вдоль высокоэнергетических границ зерен [7] и происходящее при условии выполнения критерия Гиббса-Смита: $\sigma^*(ГЗ) > 2\sigma(ГЖ)$, где ГЖ обозначает межфазную границу флюид-порода. В этом случае бесконечный кластер высокоэнергетических границ и/или ребер может служить маршрутом проникновения жидкой фазы на сколь угодно большое расстояние, в результате чего многие транспортные и прочностные свойства поликристаллического материала оказываются резко измененными. Низкое значение энергии на границе ГЖ, необходимое для межзеренного смачивания, является и предпосылкой понижения прочности твердого тела по механизму Ребиндера [4]. Поэтому жидкие межзеренные прослойки обладают собственной малой прочностью и играют роль резервуаров, откуда флюид может распространяться в ходе разрушения, смачивая стенки растущей трещины.

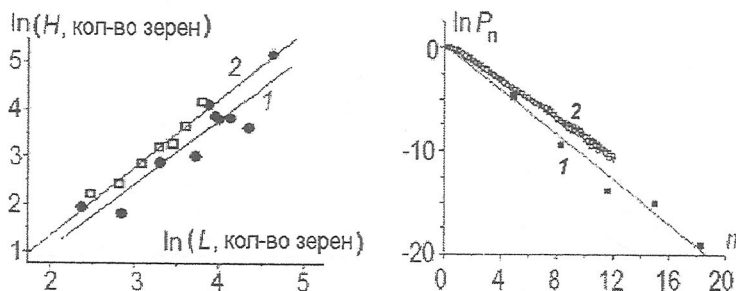


Рис. 4 (слева). Длина H проникновения жидкого галлия в цинковую фольгу в зависимости от ее ширины L (1) и результаты моделирования на квадратной решетке (2).

Рис. 5 (справа). Вероятность P_n проникновения жидкости на расстояние H от источника в зависимости от величины $n = H/L$ в эксперименте на цилиндрических поликристаллах NaCl диаметром L (1) и компьютерном моделировании на призмах с основанием $L \times L$ (2).

Необходимо помнить, что все оценки, следующие из теории перколяции, строго применимы лишь к бесконечным или полубесконечным континуумам. Точное решение задачи о коррективах, которые нужно вносить в расчеты для объектов конечных размеров, в общем случае находится в стадии разработки. Но приближенные решения для ряда конкретных условий уже получены и могут служить основой прямого сопоставления теоретических расчетов или компьютерного моделирования и результатов физических экспериментов

[13]. На рис. 4 и 5 даны примеры такого сопоставления, подтверждающие применимость теории перколяции для описания межзеренного смачивания.

Таким образом, предлагаемая методология, сочетающая детерминистский и статистический подходы, является перспективной для описания таких упорядоченно-неупорядоченных сред как пространство, заполненное полиэдрическими элементами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 06-03-33106 а.

Список литературы

1. Волович П.М., Проценко П.В., Скворцова З.Н., Траскин В.Ю. Межзёрное смачивание в поликристаллах. 1. Вероятность смачивания структурных элементов // Коллоидный журнал. 2002. Т. 64, №3. С. 302-305.
2. Жабин А.Г., Онтогенез минералов. Агрегаты. М.: Наука, 1979. 276 с.
3. Копецкий Ч.В., Орлов А.Н., Фионова Л.К. Границы зёрен в чистых материалах. М.: Наука, 1987. С. 34.
4. Перцов Н.В. Физико-химическое влияние жидких фаз на разрушение горных пород // Физико-химическая механика природных дисперсных систем. М.: Изд-во МГУ, 1985. С. 107-117.
5. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. М.: Металлургия, 1976. С. 29.
6. Траскин В.Ю., Скворцова З.Н., Модельные исследования и экспериментальные данные о транспорте жидкости по границам зёрен поликристаллов // Коллоидный журнал. 1997. Т. 59, № 6. С. 827-832.
7. Траскин В.Ю., Скворцова З.Н. Эффект Ребиндера в геодинамических процессах // Флюиды и геодинамика. М.: Наука, 2006. С. 147-164.
8. Aharony A., Stauffer D. Introduction to Percolation theory. London: Tailor & Francis, 1992.
9. Coxeter H.S.M. Close packing and froth // Ill. J. Math. 1958. V 2, N 4B.
10. Kelvin (W. Tomson). On the division of space with minimum partitional area // Phil. Mag. Ser. 5. 1887. V 24.
11. Kelvin (W. Tomson). On homogeneous division of space // Proc. R. Soc. London. 1984. V 55.
12. Traskine V., Protsenko P., Skvortsova Z., Volovitch P. Grain boundary wetting in polycrystals: wettability of structure elements and liquid phase connectivity // Colloids and Surfaces. 2000. V 166. P 261-268.
13. Traskine V., Volovitch P., Barallier L., Kucherinenko Ya., Protsenko P., Skvortsova Z. Finite size scaling in grain boundary wetting // J. Mater. Sc. 2005. V 40. P 25-39.
14. Traskine V., Volovitch P., Protsenko P., Kucherinenko Y., Botchenkov S. Percolation approach to grain boundary wetting: theory, computer simulation and experiment // Transact. JWRI. 2001. V 30. P 21-26.

КЛАССИФИКАЦИЯ ПЕТРОГРАФИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПО СТАТИСТИКАМ ТЕРНАРНЫХ КОНТАКТОВ МИНЕРАЛЬНЫХ ЗЕРЕН

Ю.Л. Войтеховский¹, К.И. Фролов²

¹ Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

² Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета, Апатиты

В петрографии важное значение имеет классификация горных пород. Обычно они различаются по химическому и минеральному составу, а также текстуре и структуре. Последние характеризуют соотношения и расположения минеральных зерен и их агрегатов в пространстве. Ранее был предложен алгебраический формализм, позволяющий однозначно характеризовать структуру горной породы. Суть подхода состоит в том, чтобы при описании петрографических структур отказаться от метрических характеристик минеральных зерен, сосредоточив внимание на отношениях контактирования.

Первым шагом в развитии этого подхода является характеристика петрографических структур статистиками двойных межзерновых контактов [1, 2]. Наличие законченной теории алгебраических квадратичных форм позволило охватить все многообразие структур горной породы, в результате чего были выделены три группы петрографических структур в зависимости от типа кривых 2-го порядка. Следующим шагом является характеристика петрографических структур статистиками тройных межзерновых контактов. Такая классификация является более полной и содержит в себе предыдущую. Эти статистики приводят к рассмотрению поверхностей 3-го порядка в пространствах, размерности которых совпадают с числом минералов в горной породе. Для простейшего случая – биминеральной горной породы – это кривые 3-го порядка на плоскости. Их перечисление и составляет нашу задачу.

Пусть m_i – минералы в n -минеральной породе, $i = 1 \dots n$; $m_i m_j$ – бинарный контакт минералов m_i и m_j , имеющий вероятность p_{ij} . Тогда уравнение

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n p_{ij} m_i m_j = 1$$

фиксирует статистику бинарных контактов в породе и одновременно задает структурную индикатрису – поверхность 2-го порядка в пространстве $(m_1 \dots m_n)$. Задача состоит в реализации этого подхода для индикатрис 3-го порядка:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n p_{ijk} m_i m_j m_k = 1$$

Для простейшего случая (биминеральной породы) $n = 2$, поэтому

$$p_{111}m_1^3 + p_{112}m_1^2m_2 + p_{122}m_1m_2^2 + p_{222}m_2^3 = 1$$

Это кривые 3-го порядка на плоскости, которые и следует классифицировать.

Первая классификация кривых 3-го порядка дана Ньютоном по числу и взаимному расположению бесконечных ветвей. Общее уравнение кривой 3-го порядка [3]:

$$Ax^3 + 3Bx^2y + 3Cxy^2 + Dy^3 + 3Ex^2 + 6Fxy + 3Gy^2 + 3Hx + 3Ky + L = 0$$

В нашем случае: $p_{111} = A$, $p_{112} = 3B$, $p_{122} = 3C$, $p_{222} = D$, $E = F = G = H = K = 0$, $L = -1$. Пусть $y = kx + b$ — уравнение асимптоты. Угловой коэффициент асимптоты определяется равенством:

$$A + 3Bk + 3Ck^2 + Dk^3 = 0 \quad (1)$$

Коэффициент b определяется равенством:

$$(B + 2Ck + Dk^2)b = -(E + 2Fk + Gk^2) \quad (2)$$

Уравнение (1) дает три действительных или одно действительное и два комплексных значения k . Этим и определяются число и направления бесконечных ветвей. Чтобы асимптота для k существовала, b должно определяться из (2). В нашем случае $E = F = G = 0$, поэтому $(B + 2Ck + Dk^2)b = 0$. Чтобы существовала асимптота, необходимы действительные k и b , т.е. $B + 2Ck + Dk^2 \neq 0$. В этом случае говорят, что ветвь имеет гиперболический тип. Если $b = 0$, то асимптота проходит через начало координат. Если при действительных k коэффициент b не определен, то ветвь не имеет асимптоты и говорят, что кривая имеет параболический тип. Таким образом, в зависимости от вида корней (1) можно подразделить все кривые 3-го порядка на четыре группы. Т.к. не нужно численное решение (1), а только его тип, воспользуемся формулой Кардано [4].

$$A + 3Bk + 3Ck^2 + Dk^3 = 0$$

где $p_{111} = A$, $p_{112} = 3B$, $p_{122} = 3C$, $p_{222} = D$. Сделав замену $k = y - \frac{p_{122}}{3}$, получим:

$$y^3 + (p_{112} - \frac{(p_{122})^2}{3})y + (p_{111} - \frac{p_{112}p_{122}}{3} + \frac{2}{27}(p_{122})^3) = 0.$$

Обозначив $t = (p_{112} - \frac{(p_{122})^2}{3})$ и $r = (p_{111} - \frac{p_{112}p_{122}}{3} + \frac{2}{27}(p_{122})^3)$, придем к уравнениям:

$$y^3 + ty + r = 0, \quad \Delta = \frac{r^2}{4} + \frac{t^3}{27}, \quad y = \sqrt[3]{-\frac{r}{2} + \sqrt{\Delta}} + \sqrt[3]{-\frac{r}{2} - \sqrt{\Delta}}.$$

Тип решения зависит от знака Δ . Ниже мы приводим эти группы, сохраняя название по Ньютону и указывая характерные формы.

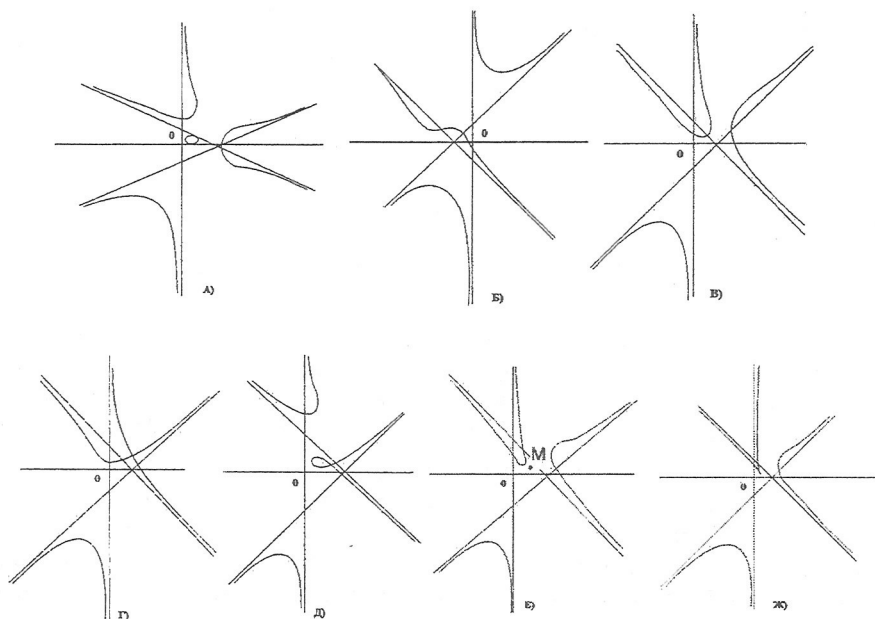


Рис. 1. Кривые 1-ой группы.

1-я группа: $\Delta < 0$ — все три корня (1) действительны и различны; кривая имеет три асимптоты и три гиперболические ветви. Кривые этой группы носят название *hyperbolae reduntantes* (раскинутые гиперболы). Их основные формы:

— три гиперболические ветви и овал или две гиперболические и одна прямолинейная ветвь; прямолинейной называется ветвь, вытянутая вдоль асимпто-

ты, которую пересекает и к которой приближается в двух противоположных направлениях (рис. 1 а, б),

- три гиперболические ветви (рис. 1 в),
- три гиперболические ветви, две из которых пересекаются, или три гиперболические ветвей, одна из которых имеет узловую точку (рис. 1 г, д),
- три гиперболические ветви и изолированная точка (рис. 2 е),
- три гиперболические ветви, одна из которых имеет точку возврата (рис. 1 ж).

2-я группа: $\Delta > 0$ – уравнение (1) имеет один действительный корень, кривые имеют одну асимптоту и прямолинейную ветвь. Они называются *hyperbolae defectivae* (дефективные гиперболы). Их основные формы:

- одна прямолинейная ветвь и овал (рис. 2 а),
- одна прямолинейная ветвь (рис. 2 б),
- прямолинейная ветвь с узлом (рис. 2 в),
- прямолинейная ветвь и изолированная точка (рис. 2 г),
- прямолинейная ветвь с точкой возврата (рис. 2 д).

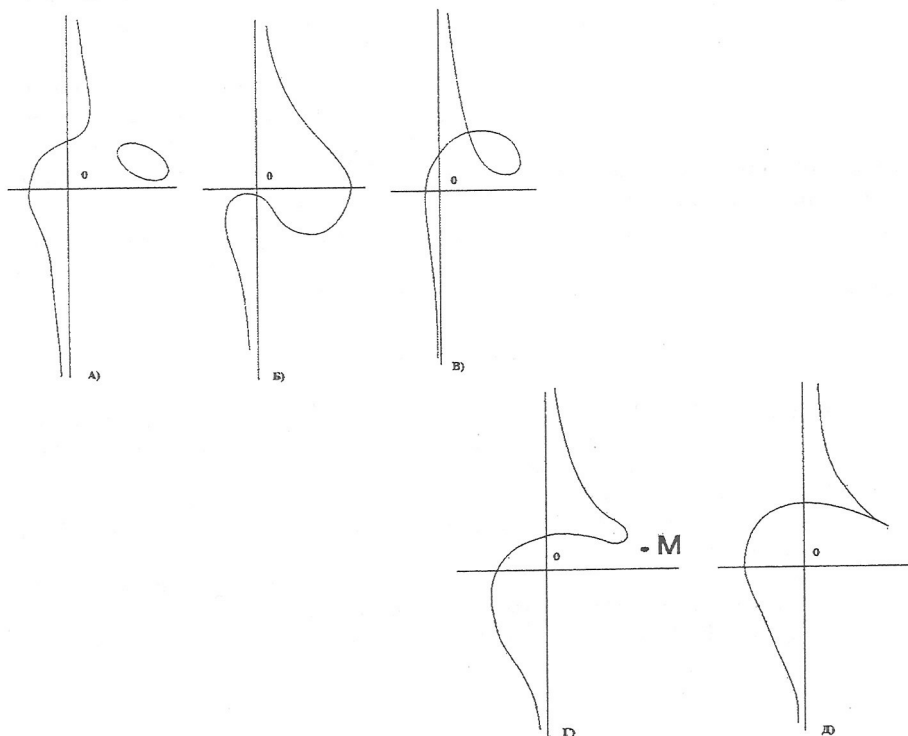


Рис. 2. Кривые 2-ой группы.

3-я группа: $\Delta = 0$ – уравнение (1) имеет двукратный действительный корень и $E+2Fk+Gk^2 = 0$. Эти кривые называются *hyperbolism sectionum conicarum* (гиперболизмы конических сечений). Их основные формы:

– две ветви с общими асимптотами и бесконечно удаленной точкой возврата (рис. 3 а),

– прямолинейная ветвь с бесконечно удаленной изолированной точкой (рис. 3 б).

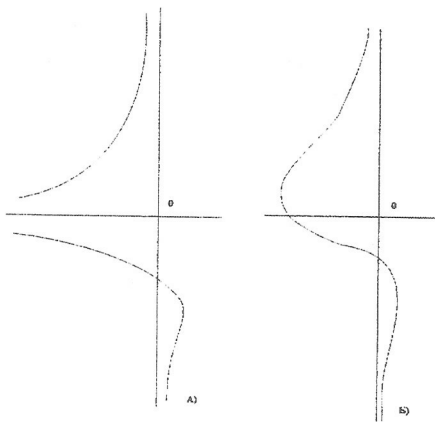


Рис. 3. Кривые 3-ей группы.

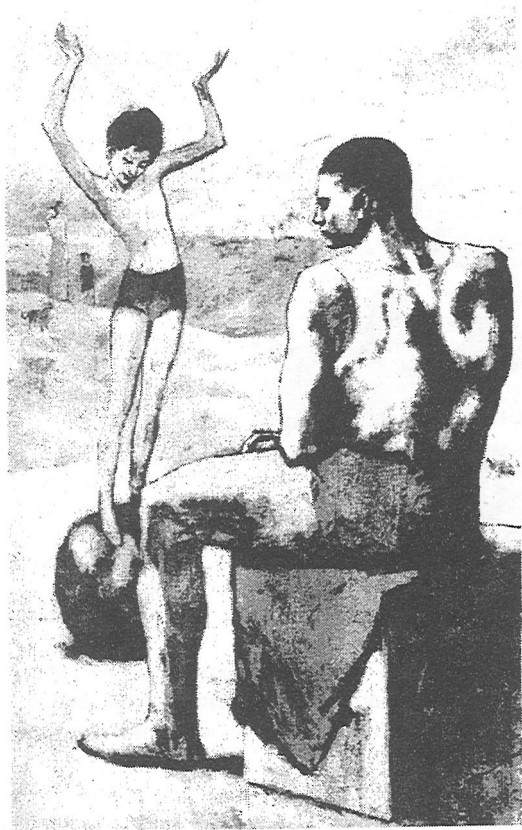
4-я группа: $\Delta = 0$, $t = 0$ – уравнение (5) имеет трехкратный действительный корень. Здесь возможен лишь один случай: $E+2Fk+Gk^2 = F+Gk = 0$, при этом $H+Kk = 0$ – кривая распадается на три параллельные прямые.

Даже для биминеральных горных пород мы имеем дело с большим разнообразием типов. Естественным разви-

тием этого подхода представляется построение классификации по статистикам тернарных контактов в полиминеральной горной породе. Но здесь мы сталкиваемся с поверхностями третьего порядка в пространствах, размерность которых совпадает с числом минералов, входящих в горную породу. Для их классификации не хватает теоретической основы.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Приложение теории квадратичных форм к проблеме классификации структур полиминеральных горных пород // Изв. ВУЗов. Геология и разведка. 1995. № 1. С. 32-42.
2. Войтеховский Ю.Л. Количественный анализ петрографических структур: метод структурной индикатрисы и метод вычитания аксессуаров // Изв. ВУЗов. Геология и разведка. 2000. № 1. С. 50-54.
3. Савелов А.А. Плоские кривые. Систематика, свойства, применение. Москва-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2002. 294 с.
4. Смирнов В.И. Курс высшей математики. Т. 1. М.: Физматиз, 1962. 478 с.



П. Пикассо (1881-1973). Девочка на шаре (1905).

ИКОСАЭДРИЧЕСКИЕ ВИРУСЫ И ФУЛЛЕРЕНЫ: ДВА МИРА, ОДНА ГЕОМЕТРИЯ

Ю.Л. Войтеховский. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

Пожалуй, нигде так ярко не проявляется единство замысла и рациональность природы как в скелетах радиоларий, молекулах фуллеренов и капсидах икосаэдрических вирусов.

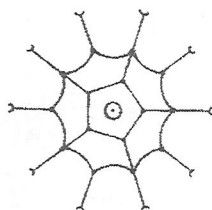
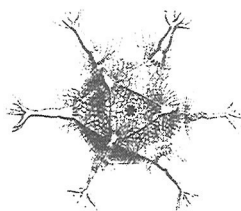
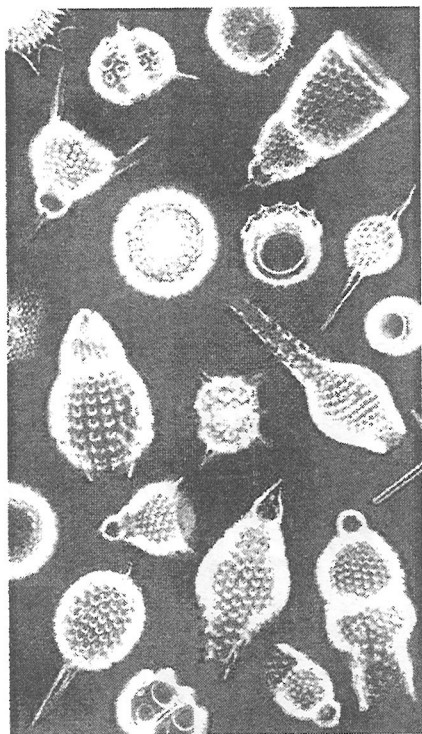


Рис. 1. Слева – мир *Radiolaria*.
справа сверху – *Circogonia icosahedra* (Геккель, 1902).
справа внизу – *Circogonia dodcahedra* (Мордухай-Болтовской, 1936).

Обратим внимание на то, что в мире радиоларий имеет место геометрический дуализм икосаэдра и додекаэдра, запечатленных в названиях двух биологических видов (рис. 1). Тот же дуализм многообразий фуллеренов и икосаэдрических вирусов ранее не обсуждался. Напомним, что в узком смысле под фуллереном понимают полиэдрическую углеродную молекулу (чаще всего C_{60} и C_{70}), образованную 5- и 6-членными кольцами, сходящимися по три (рис. 2). В более широком смысле под фуллереном понимают любой простой полиэдр, на котором разрешены лишь 5 и 6-угольные грани. В этом смысле простейшим фуллереном является додекаэдр. Легко доказывается, что 5-

угольных граней на каждом фуллере ровно 12. Поэтому ясно, что дуальным к фуллерену будет симплициальный (все грани треугольные) полиэдр, у которого ровно 12 вершин имеют валентность 5, все остальные – 6.

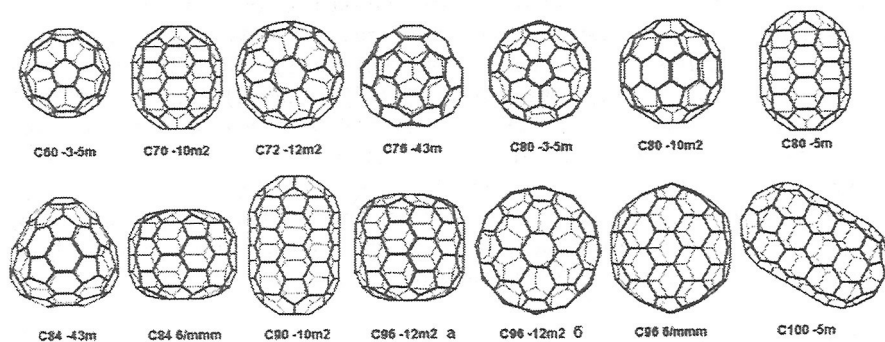


Рис. 2. Фуллерены диапазона $C_{60} - C_{100}$, потенциально стабильные в природе.

Именно такую организацию показывают капсиды икосаэдрических вирусов (рис. 3), которые в первом приближении представляют собой мегаикосаэдры с гранями – фрагментами 2-мерной плотнейшей шаровой упаковки. Дуальные к ним фуллерены представляют собой мегадодекаэдры. Таким образом, их математическое описание совпадает с точностью до дуального перехода.

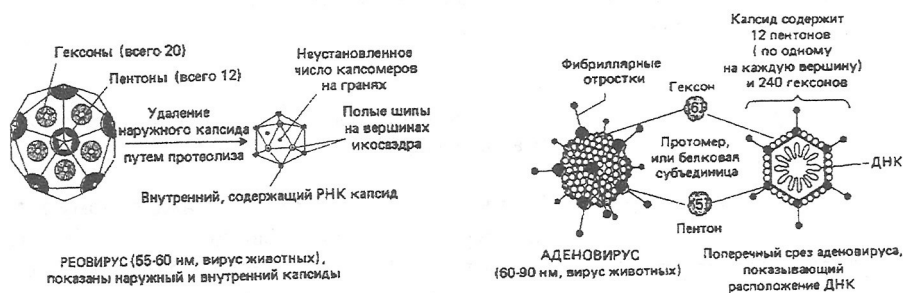


Рис. 3. Строение икосаэдрических вирусов (Рис, Стернберг, 1988).

Внутренняя геометрия грани определяется ориентировкой цепочек глобул относительно ребра мегаикосаэдра. Именно это обстоятельство использовано в теореме Каспара-Клюга, определяющей число элементарных граней (образованных тремя соседними белковыми глобулами) икосаэдрического вируса и, соответственно, вершин додекаэдрического фуллере. Рассмотрим сначала простейший случай, когда цепочки упакованы строго вдоль ребер мегаикосаэдра.

Очевидно, если ребро капсида увеличить в $t \in \mathbb{N}$ раз, то его площадь и число глобул на грани увеличится в t^2 раз. Поэтому можно считать, что капсид (h, k) порождает бесконечную серию капсидов (th, tk) . Далее, известно, что фуллерен C_{60} есть усеченный икосаэдр, а последний дуален додекаэдру, т.е. фуллерену C_{20} . Рассмотрим процедуру дуального перехода с последующим усечением всех вершин как вторую процедуру, порождающую серию все более сложных фуллеренов (и дуальных к ним икосаэдрических капсидов).

Табл. 1. Значения h^2+hk+k^2 для $0 \leq k \leq h \leq 10$.

$k \backslash h$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1	4	9	16	25	36	49	64	81	100
1	3	7	13	21	31	43	57	73	91	111
2		12	19	28	39	52	67	84	103	124
3			27	37	49	63	79	97	117	139
4				48	61	76	93	112	133	156
5					75	91	109	129	151	175
6						108	127	148	171	196
7							147	169	193	219
8								192	217	244
9									243	271
10										300

Пусть исходный фуллерен имеет f граней и $v = 2f-4$ простых вершин. Тогда дуальный полиэдр имеет $f_1 = 2f-4$ треугольных граней и $v_1 = f$ вершин (12 валентности 5 и $f-12$ валентности 6). Новый фуллерен, т.е. усеченный дуальный полиэдр, имеет $f_2 = (2f-4) + f = 3f-4 = v + f$ граней и $v_2 = 12 \times 5 + 6(f-12) = 6f-12 = 3(2f-4) = 3v$ вершин. Последнее обстоятельство позволяет определить индексы полученного полиэдра. А именно, приравнивая ребро капсида, т.е. диагональ параллелограмма на рис. 4, к $\sqrt{3}(h^2 + hk + k^2)$, несложными вычислениями получаем его ориентацию $(h+2k, h-k)$. Обратное преобразование имеет вид $[(h+2k)/3, (h-k)/3]$. Заметим, кроме того, что двукратное преобразование второго типа приводит к преобразованию подобия с $t=3$: $(h, k) \rightarrow (h+2k, h-k) \rightarrow (3h, 3k)$.

Сказанное выше позволяет ввести понятие генератора – капсида, не сводимого к более простому никаким из двух преобразований: $(h, k) \rightarrow (h/t, k/t)$ и $(h, k) \rightarrow [(h+2k)/3, (h-k)/3]$. Таким образом, капсид (h, k) – генератор, если: (а) h и k взаимно просты, (б) h не сравнимо с $k \pmod{3}$. Для $0 \leq k \leq h \leq 10$ генераторы показаны в табл. 2. Очевидно, их значительно меньше, чем допустимых капсидов.

Заметим, что из двух пар капсидов-изомеров сохранилась лишь одна, оба имеют точечную группу симметрии 235. Вопрос о семействах изомеров имеет самостоятельное теоретическое и практическое – как для фуллеренов, так и для икосаэдрических вирусов – значение. По сути, задача состоит в различных представлениях числа h^2+hk+k^2 . На сегодня компьютерным перебором найдены все семейства капсидов-изомеров для $0 \leq k \leq h \leq 1000$. Но задача еще ждет аналитического решения, например, в следующих постановках: найти минимальную серию с заданным числом капсидов-изомеров (и заданной точечной группой симметрии -3-5m или 235).

Табл. 2. Значения h^2+hk+k^2 для генераторов, $0 \leq k \leq h \leq 10$.

$k \backslash h$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1									
1		7	13		31	43		73	91	
2			19				67		103	
3				37	49		79	97		139
4					61				133	
5						91	109		151	
6							127			
7								169	193	
8									217	
9										271
10										

Список литературы

Геккель Э. Красота форм в природе. СПб: Т-во "Просвещение", 1902. Вып. 1-18, табл. 1-90.

Мордухай-Болтовской Д.Д. Геометрия радиолярий // Уч. зап. Ростовского-на-Дону гос. ун-та. 1936. Вып. 8. С. 3-91.

Рис Э., Стернберг М. От клеток к атомам. М.: Мир, 1988. 144 с.

Caspar D.L.D., Clug A. Physical principles in the construction of regular viruses // Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol. 1962. N 27. P 1-24.

КОМБИНАТОРНОЕ МНОГООБРАЗИЕ ШАРОВЫХ УКЛАДОК НА СФЕРЕ

М.Н. Мельник

Кольский филиал Петрозаводского госуниверситета, Апатиты

В данной работе смоделированы шаровые укладки на сфере и оценено их комбинаторное многообразие для различного числа шаров. В ходе моделирования изучено влияния параметров модели на получаемые результаты.

Реальным объектом, с которым можно отождествить шаровую укладку на сфере, является колония зеленой водоросли *Pandorina morum* (Müll) Bory (рис. 1), изученная ранее [1, 2]. Ее модель строится в предположении, что клетки, группируясь вокруг центра, образуют клеточное разбиение сферы. Исходная модель предполагала размеры всех клеток одинаковыми. Установлено, что комбинаторный тип колоний с 4 ... 15 клетками определяется уникально. Для 16-клеточных взрослых колоний есть два типа с симметриями 222 и $-43m$ в количественном отношении 1:3 [2].

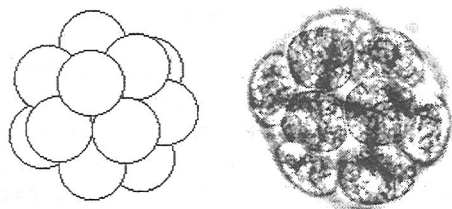


Рис. 1. Колония зеленой водоросли *Pandorina morum* (Müll) Bory и моделирующая ее шаровая укладка.

Мы рассматриваем более общую модель, в которой размеры клеток варьируют в некоторых пределах. Это допущение основано на анализе возможных форм для 16-клеточной колонии [1]. Одна из них с симметрией $-7m$ может существовать только при наличии двух клеток большего, по сравнению с остальными, размера (рис. 2). Эта модель более характерна для реальной колонии *Pandorina morum* (Müll) Bory.

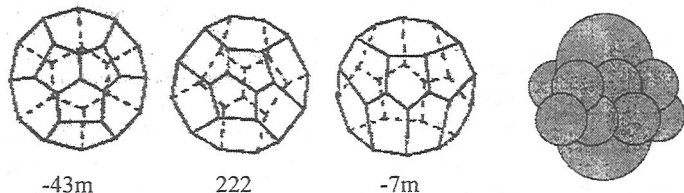


Рис. 2. Теоретически возможные формы 16-клеточной колонии *Pandorina morum* (Müll) Bory и объяснение существования колонии с симметрией $-7m$.

На начальной стадии все шары хаотично расположены на сфере. Затем между ними начинают действовать силы отталкивания, распределяющие их равномерно. Допускается, что расстояние между двумя соседними шарами может быть меньше суммы их радиусов. Сила отталкивания между шарами вычисляется по формуле $F = r_1 \times r_2 / s$, где r_1, r_2 — радиусы шаров, s — расстояние между ними. Все шары взаимодействуют друг с другом, но соседние — сильнее. По сути, взаимодействие не соседних шаров мало влияет на окончательную укладку.

Между шарами и центром сферы действует сила, препятствующая выталкиванию шара за пределы укладки и попаданию его внутрь последней. Это разрешает укладки, которые в случае расположения центров шаров строго на сфере были бы невозможны. Сила притяжения шара к центру сферы вычисляется по формуле $F = k(z - z_0)$, где k — коэффициент упругости, выбираемый произвольно, z — расстояние до центра сферы; z_0 — радиус сферы. Все шары взаимодействуют с центром сферы независимо от размеров. Радиус сферы находится из предположения, что площадь поверхности сферы равна сумме поперечных сечений всех шаров, по формуле $z_0 = r(N/2)^{1/2}$, где N — число шаров в укладке, r — некоторое среднее значение их радиусов.

Для каждого N в диапазоне от 4 до 16 моделировалось 1000 упаковок. Выбор диапазона объясняется тем, что водоросль *Pandorina morum* (Müll) Borg в ходе роста может образовывать 4- ... 16-клеточные колонии. Случайных характер начальных координат шаров на сфере обеспечивал независимость появления упаковок. Радиусы шаров случайным образом выбирались в пределах 10 % относительно фиксированного значения. Образование упаковки представляло собой многократное смещение шаров в зависимости от результирующей силы воздействия на каждый шар. По истечении некоторого числа смещений укладка приходила в устойчивое состояние.

По конечным координатам шаров определялся комбинаторный тип укладки. На системе точек — центров шаров строилась выпуклая симплициальная оболочка. По ней строился дуальный полиэдр, грани которого соответствовали шарам. Необходимость его получения объясняется возможностью дальнейшего анализа ранее разработанными средствами [3]. Для каждого полиэдра определялась его точечная группа симметрии. Результаты моделирования даны в табл. 1. Видно, что различие в размерах шаров приводит к появлению дополнительных комбинаторных типов упаковок с преобладанием основного типа, ранее полученного при одинаковом размере шаров. В целом во всех укладках из 4-16 шаров доминирует один тип. Для упаковок с 4-6, 8, 9 и 12 шарами он определяется однозначно. Для упаковок с 7, 10, 11, 13-16 шарами есть несколько комбинаторных типов. Но только для упаковок с 15 и 16 шарами доля новых типов значительна. Для 15 шаров выяснилось, что симметрия

не может служить однозначной характеристикой укладки: существуют две комбинаторно различные укладки с симметрией m .

Таблица 1. Результаты компьютерного моделирования шаровых упаковок.

Т.Г.С.	число шаров в упаковке												
	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1													76
2								2			6		
m											5	102/1	
mm2								998		970	3		
3m				2			60			30			
222													122
-42m					1000								
-6m2		1000				1000						897	
-43m	1000												802
-8m2							940						
-10m2				998									
-12m2											985		
m3m			1000								1		
-3-5m									1000				

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (Müll) Bory (Volvocaceae) // Журнал общей биологии. 2001. Т. 62, № 5. С. 425-429.
2. Степенщиков Д.Г. Комбинаторная геометрия выпуклых полиэдров: вычислительные алгоритмы, решённые и нерешённые задачи // Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во "К & М", 2005. С. 33-47.
3. Тимофеева М.Г., Войтеховский Ю.Л. Фуллерены в живой природе – полиэдрические колонии *Pandorina morum* (Müll) Bory // Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во "К & М", 2005. С. 82-90.

ОРГАНИЗАЦИЯ КОЛОНИЙ *PANDORINA MORUM* (MÜLL.) BORY – БИОЛОГИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ СПЕЦИАЛЬНОГО РАЗБИЕНИЯ СФЕРЫ

М.Г. Тимофеева. Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты

Систематические исследования комбинаторно-топологических и метрических свойств биологических тканей, рассматриваемых как фрагменты 2- и 3-мерных мозаик, начаты Льюисом (Lewis, 1923, 1925, 1926, 1933, 1943a, b, 1944, 1946). Суть проблемы состоит в том, чтобы в клеточной организации ткани, имеющей, на первый взгляд, случайный характер, различить инварианты, заданные пространством вложения, и вариабельные черты, определяемые условиями и механизмами онтогенеза. Интерес представляют и те, и другие. Первые могут служить целям типизации тканей и организмов, вторые – реконструкции условий и механизмов роста. В отечественной биологии подходы Льюиса использованы и развиты в работах В.В. Смольянинова и В.М. Маресина (1971, 1972, 1980). Среди прочего, авторы смоделировали и экспериментально исследовали рост полиэдрических колоний *Volvox aureus* Ehr., представляющих собой клеточное разбиение сферы. Последнее обстоятельство накладывает специфические ограничения на характер организации колоний, но огромное число (1024) клеток, образующих зрелые колонии, не позволяет рассчитать потенциальное разнообразие морфологических типов.

Моделирование колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory. Еще одно моделирование колоний *Volvocaceae* выполнено на примере *Pandorina morum* (Müll.) Bory (Войтеховский, 2001). Зелёные водоросли семейства *Volvocaceae* показывают любопытный пример самоорганизации, подчинённой топологическим закономерностям разбиения двумерной сферы выпуклыми полигонами и приводящей к полиэдрическим формам.

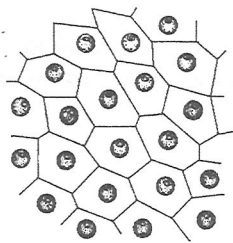
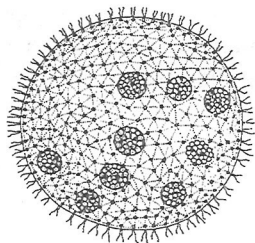


Рис. 1 (слева). Триангуляция поверхности *Volvox aureus* Ehr., дуальная к разбиению на рис. 2.

Рис. 2 (справа). Полигональное разбиение сферической поверхности ценобия *Volvox polychlamys* Korsch.

Действительно, *Pandorina morum* (Müll.) Bory, *Volvox aureus* Ehr., *Volvox polychlamys* Korsch. и *Volvox globator* (L.) Ehr. образуют колонии хламидомонадоподобных клеток в виде однослойных сфер диаметром до 2 мм. При этом они

так плотно стянуты тяжами-плазмодесмами, что колонии образуют полиэдрическую форму. На Рис. 1. показаны плазмодесмы, образующие триангуляцию сферы, дуальную к разбиению на рис. 2., на котором видны полигональные очертания клеток и их ядра без плазмодесм (Голлербах, 1977). На этих рисунках показана типичная организация колоний для названных видов *Volvocaceae*. При этом колонии названного вида содержат от 16 (*Pandorina morum* (Müll.) Bory) до 2000 (*V. polychlamys* Korsh. и *V. globator* (L.) Ehr.) клеток, которые сходятся по три в каждой вершине полиэдра, т.е. образуют т.н. простые полиэдры. Клетки примерно одного размера и стремятся окружить себя шестью такими же подобно тому, как бильярдный шар окружён шестью другими на поверхности стола. В результате 3- и 4-угольные грани на колониях *Volvocaceae* отсутствуют. Выпуклый полиэдр, у которого одновременно отсутствовали бы 3-, 4- и 5-угольные грани, невозможен. В результате колонии *Volvocaceae* содержат 5-угольные грани. Крупные 8-угольные грани встречаются крайне редко и соответствуют репродуктивным клеткам (на рис. 1 видны 9 дочерних колоний).

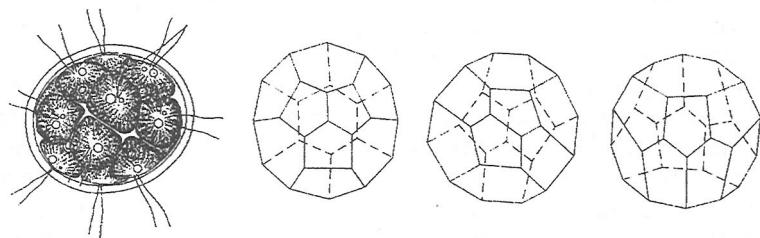


Рис. 3. Реальный облик (Дедусенко-Щеголева и др., 1959; Голлербах, 1977) и теоретически возможные комбинаторные типы колоний *P. morum* с точечными группами симметрии (слева направо) -43m, 222 и -14m2.

Итак, в соответствии с эмпирическими наблюдениями (Дедусенко-Щеголева и др., 1959; Голлербах, 1977) и математическими закономерностями разбиения сферы возможны лишь три комбинаторных типа зрелых 16-клеточных полиэдрических ценобиов *Pandorina morum* (Müll.) Bory (рис. 3). Два из них (-43m и 222) принадлежат к типу фуллеренов, т.е. полиэдров, на которых разрешены лишь 5- и 6-угольные грани, сходящиеся по три. Один из них (222), не обладающий плоскостью симметрии, допускает энантиоморфный двойник. Возникает вопрос о распространенности морфологических типов колоний в природе и их обусловленности условиями и механизмами онтогенеза. Его исследование представляется важным в связи с тем, что космополитный вид *P. morum* считают морфологически однообразным (Десницкий, 1991, 1995, 1996, 2003), а характер роста колоний до сих пор недостаточно изучен (Angeler, 1998; Desnitski, 2000).

Материалы и методы. Для подтверждения теоретических результатов проведен эксперимент, в котором использовалась культура *P. morum*, полученная в лаборатории альгологии МГУ. Материал выращивали в питательной среде Прата, для приготовления которой использовали дистиллированную воду и реактивы марки "чда" (в г/л воды): $\text{KNO}_3 - 0.1$, $\text{K}_2\text{HPO}_4 - 0.01$, $\text{Mg}_2\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O} - 0.01$, $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O} - 0.001$, 5 мл/л почвенной вытяжки (Садчиков, 2003). Водородный показатель среды близок к нейтральному ($\text{pH} = 6-7$). Выращенную синхронную культуру помещали в колбу в количестве 1/5 от ее объема и тщательно перемешивали при температуре 20-23 °C и освещении лампами дневного света в течение суток (Мосиенко, 1974). В дальнейшем культуру выращивали в комнатных условиях с режимом освещения: ночь – 8 ч., день – 16 ч. Продолжительность эксперимента от 1 до 1.5 мес. с наблюдениями через каждые 2-3 сут. Для характеристики динамики популяции всякий раз подсчитывали число колоний с различным числом клеток, их линейные размеры и морфологические типы.

Морфологические типы колоний *P. morum* определяли тремя способами. Во-первых, микроскопическое фотографирование колонии, свободно вращающейся в капле воды, в нескольких ракурсах позволяло получить представление о характере сцепления клеток. Во-вторых, наложение покровного стекла позволяло зафиксировать колонию и, изменяя фокусировку, проявить ее обратную сторону. В обоих случаях для идентификации комбинаторного типа колонии полезно сравнение ее фотоизображений (полученных под микроскопом в проходящем свете, $\times 250-300$) с компьютерными моделями, для чего написана специальная программа. Определение точечных групп симметрии полиэдрических колоний выполняли с помощью каталогов (Войтеховский, 1999, 2000; Войтеховский и др., 2000). При этом не следует исключать возможность ошибок реконструкции 3-мерной колонии по 2-мерным изображениям. Результаты наблюдений обрабатывали и сравнивали с применением методов математической статистики, что позволяет считать их достоверными на приемлемом уровне значимости.

Результаты и обсуждение. В результате нескольких параллельных экспериментов установлено следующее. Колонии *P. morum* растут путем присоединения новообразованных (в результате последовательного деления) клеток к уже существующей колонии, пока не образуется зрелый 16-клеточный ценобий. Начальная стадия процесса хорошо видна на рис. 4, где рядом сосуществуют отдельные клетки, а также их сочетания по две и три. Из организации 4- и 6-клеточной колоний видно, что клетки молодых поколений изначально более мелкие и постепенно дорастают до среднего размера. Это видно из того, что в колониях, близких к полным, все клетки уже имеют один размер. Полиэдрическую форму колония приобретает на заключительном этапе. Молодые 16-клеточные колонии еще содержат отверстия между клетками. Для

определения частотных спектров проведено 15 параллельных экспериментов в 10 повторностях каждый. Повторность – это подсчет числа колоний в одной популяции в течение месяца с периодичностью 2-3 дня (рис. 5).

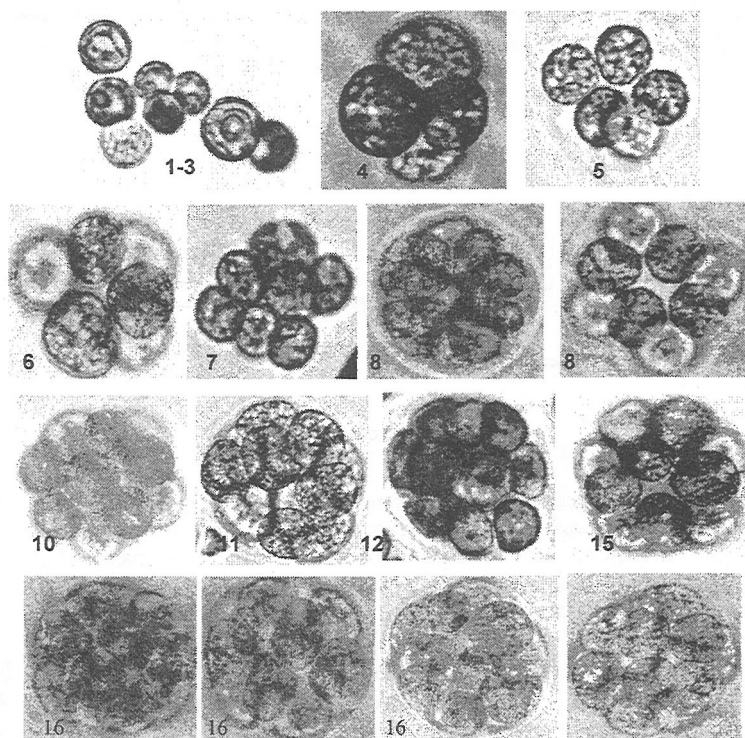


Рис. 4. Колонии *P. morum* с различным числом (даны внизу для каждой колонии) клеток.

В результате эксперимента получены практически одинаковые частотные спектры с хорошо различимыми модами (в порядке убывания) для 8-, 4- и 6-клеточных колоний. Это свидетельствует о его типичности, но требует объяснения. Преобладающая организация 4-, 6- и 8-клеточных колоний показана на рис. 4. В первой легко угадывается тетраэдрический (симметрия $-43m$), во второй – октаэдрический ($m-3m$) мотив. Но 6-клеточные колонии часто сжаты вдоль тройной оси до тригональной антипризмы ($-3m$). Аналогично, 8-клеточные колонии чаще всего имеют комбинаторную симметрию тетрагонального тетраэдра ($-42m$), но при уплотнении происходит разворот двух 4-клеточных комплексов друг относительно друга с понижением симметрии до 222. Это можно видеть на рис. 4, если полиэдризовать колонию (второй ряд

справа), соединив отрезками центры контактирующих клеток. На рис. 6 даны распределения размеров 4-, 8- и 16-клеточных колоний *P. morum*. На основании критерия χ^2 все они имеют нормальный (гауссов) характер на уровне значимости 0.05, что типично для однородных выборок биологических объектов. Слабая правая асимметрия обусловлена наличием небольшого числа относительно крупных колоний.



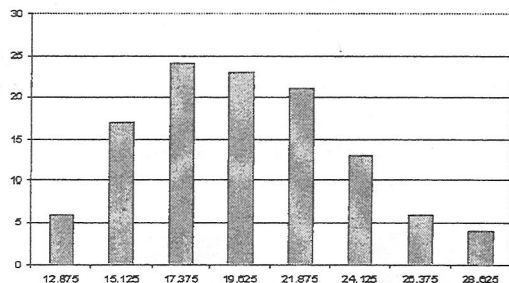
Рис. 5. Зависимость числа колоний *P. morum* от числа клеток в них. Ряды 1-10 соответствуют последовательным датам. Некоторые ряды практически сливаются, что подчеркивает типичность частотного спектра – наличие мод (в порядке убывания) для 8, 4 и 6 клеток. Различие рядов по вертикальной шкале обусловлено различным общим числом учтенных колоний.

Колонии, содержащие другое число клеток, образуют неустойчивые формы, быстро переходящие в стабильные. В популяциях встречаются также неупорядоченные 4-, 6- и 8-клеточные колонии, но их немного, и они быстро приходят к стабильным конфигурациям. Типичная 16-клеточная колония показана на рис. 4. Всего проанализированы 114 колоний, из которых 73 имели симметрию -43m, 24 – симметрию 222, и всего две – симметрию -14m2. В 15 случаях симметрия не определена, так как колонии не были вполне сформированы и между клетками еще сохранялись поры. Таким образом, из трех теоретически возможных комбинаторных типов полиэдрических колоний *P. morum* (рис. 1) достоверно установлены два (-43m и 222), встречающиеся в пропорции 3:1.

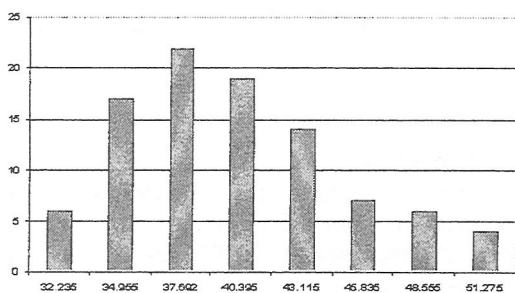
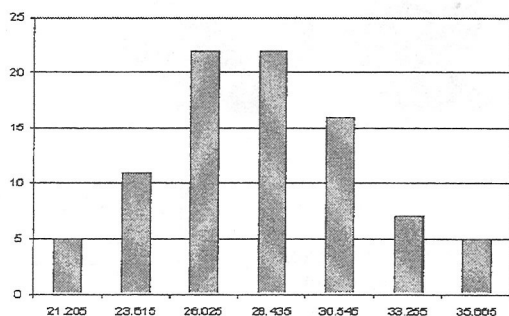
Для теоретического определения морфологического разнообразия колоний программно реализована следующая модель. Каждая клетка представлялась в виде шара, расположенного на сфере. Перемещения клеток происходят так, что их центры все время остаются на сфере. Модель реализует этап формирования колонии, при котором клетки уже образовали сферическую поверхность и стремятся занять на ней наиболее выгодное расположение, тесня друг

друга, что моделируется силой отталкивания. Генерирование колонии из N клеток имеет два варианта: "рост" колонии добавлением новых клеток и случайное расположение на сфере сразу всех N клеток. Оба приводят к одному результату – до $N = 15$ колонии формируются уникальным образом, для $N = 16$ возможны два устойчивых типа с симметриями $-43m$ и $-8m2$ (рис. 7), т.е. только для данных ценобиев можно говорить о частотном распределении по морфотипам.

Рис. 6. Распределения размеров 4-, 8- и 16-клеточных (сверху вниз) колоний *P. morum*. Число классов k рассчитано по формуле Стрэйджерса $k = 1 + 3.32 \lg N$, где N – общее число измеренных колоний. По горизонтальным осям гистограмм даны середины классов в микронах.



В результате многократного генерирования колоний (> 30000) методом Моте-Карло определено соотношение между числом колоний с симметрией $-43m$ и 222. Динамика показана рис. 8. По мере роста числа прогенерированных колоний отношение асимптотически приближается к 2.9, что хорошо согласуется с экспериментом. Полиэдрические колонии типа $-7m$ не зафиксированы в компьютерном эксперименте. Очевидно, этому противоречит жестко зафиксированное равенство размеров клеток, при котором ни одна из них не может находиться в окружении семи подобных. Такая конфигурация неустойчива при уплотнении колонии.



Результаты могут быть интерпретированы в рамках принципа диссимметрии Кюри, который гласит, что в растущем объекте сохраняются лишь те элемен-

ты симметрии, которые не противоречат симметрии среды. Не реализовавшиеся элементы симметрии характеризуют степень его диссимметрии. Особенностью рассмотренной ситуации является то, что покоящаяся водная среда, с одной стороны, и отсутствие двигательной специализации клеток, с другой, не накладывают никаких ограничений на симметрию колоний *P. morum*. В соответствии с этим, среди полно развитых 16-клеточных колоний наиболее распространен самый симметричный тип -43m. Реже (как и для 8-клеточных колоний) встречается тип 222, особенностью организации которого являются три взаимно перпендикулярные оси симметрии 2-го порядка. Именно они "разрешают" свободное вращение колоний в 3-мерном пространстве. По-видимому, их наличие является минимальным требованием к существованию колоний типа *P. morum* в природной среде. Колонии типа -14m2, наверное, в природе отсутствуют. В их организации выделяются две клетки в семерной координации, что невозможно при их близком размере.

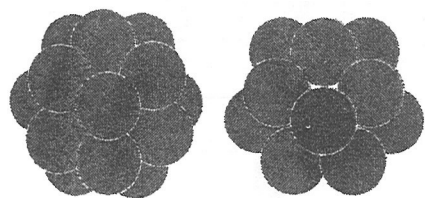
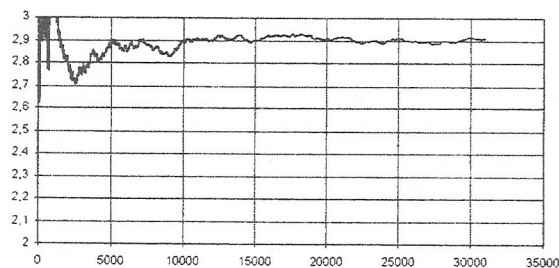


Рис. 7. Два типа 16-клеточной колонии *P. morum* (слева направо): -43m и -8m2.

Рис. 8. Динамика отношения числа колоний *P. morum* с симметриями -43m и -8m2 в компьютерном эксперименте.



Предложенная интерпретация подтверждается и на примере 8-клеточных колоний. Среди них преобладают колонии с симметрией тетрагонального тетраэдра (-42m). В многообразии 8-гранников есть лишь три более симметричные формы (Войтеховский, 1999): гексагональная призма (6/mmm), усеченный кубический тетраэдр (-43m) и куб, усеченный по двум противоположным вершинам (-3m). Их реализация в виде колоний типа *P. morum* приводит к следующим координациям клеток: 4 и 6, 3 и 6, 3 и 5, соответственно. Это невозможно при их близких размерах. Легко себе представить, что клетки с координациями 3 и 4 (т.е. зажатые между тремя и четырьмя другими) должны быть существенно меньше окружающих.

Закключение. В работе представлены результаты изучения морфологического разнообразия полиэдрических колоний *P. morum* в искусственной среде, близкой к природной. Установлено, что чаще всего встречаются 4-, 6- и 8-клеточные колонии. Полноразвитые 16-клеточные колонии составляют малую долю от общего числа. Для колоний соблюдается принцип диссимметрии Кюри – из теоретически возможных форм реализуются самые симметричные, максимально реализующие симметрию покоящейся водной среды. Распределение размеров колоний с заданным числом клеток имеет нормальный характер, что типично для однородных выборок. Интерес представляет изучение распространенности 8- и 16-клеточных энантиоморфов с симметрией 222 и стабильности пропорции 3:1 типов -43m и 222 развитых 16-клеточных ценобиов в различных средах.

Список литературы

Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: приводимые 4- ... 8-эдры, простые 9- и 10-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 1999. 60 с.

Войтеховский Ю.Л. Грануломорфология: простые 11-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2000. 70 с.

Войтеховский Ю.Л. О морфологическом разнообразии колоний *Pandorina morum* (Müll.) Bory (*Volvocaceae*) // Журн. общ. биол. 2001. № 5. С. 425-429.

Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Ярыгин О.Н. Грануломорфология: простые 12- и 13-эдры. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН. 2000. 75 с.

Голлербах М.М. (Ред.) Жизнь растений. Т. 3. Водоросли. Лишайники. М.: Просвещение. 1977. С. 266-273.

Дедусенко-Щеголева Н.Т., Матвиенко А.М., Шкорбатов Л.А. Определитель пресноводных водорослей СССР. Вып. 8. Зеленые водоросли. Класс вольвоксовые. М.; Л.: Изд-во АН СССР. 1959. С. 200-221.

Десницкий А.Г. Механизмы и эволюционные аспекты онтогенеза рода *Volvox* (*Chlorophyta*, *Volvocales*) // Ботан. журн. 1991. № 5. С. 657-667.

Десницкий А.Г. О скорости клеточных делений в ходе бесполого развития у *Volvox globator* и *V. spermatozophora* (*Chlorophyta*, *Volvocales*) // Ботан. журн. 1995. № 8. С. 40-42.

Десницкий А.Г. О географическом распространении видов рода *Volvox* (*Chlorophyta*, *Volvocales*) // Ботан. журн. 1996. № 3. С. 28-33.

Десницкий А.Г. Особенности географического распространения ценобиальных вольвоксовых (*Volvocaceae*, *Chlorophyta*) // Ботан. журн. 2003. № 11. С. 52-61.

Мосиенко Т.К. Методические указания по проведению токсикологических экспериментов. Л.: Наука. 1974. 15 с.

Садчиков А.П. Методы изучения пресноводного фитопланктона: методическое руководство. М.: Университет и школа, 2003. 157 с.

Смолянинов В.В., Маресин В.М. Организация колонии вольвокс // Онтогенез. 1971. № 6. С. 632-640.

Смолянинов В.В., Маресин В.М. Модель роста колонии вольвокс // Онтогенез. 1972. № 3. С. 299-307.

Смольянинов В.В. Математические модели биологических тканей. М.: Наука, 1980. 368 с.

Angeler D.G. Life-cycle studies and culture experiments for identification of doubtful volvocacean organisms – observations on *Pandorina* and *Eudorina* // *Hydrobiologia*. 1998. V 369-370. P 269-275.

Desnitski A.G. Development and reproduction of two species of the genus *Volvox* in a shallow temporary pool // *Protistology*. 2000. N 1(4). P. 195-198.

Lewis F.T. The typical shape of polyhedra in vegetable parenchyma and the restoration of that shape following cell division // *Proc. Amer. Acad.* 1923. V 58. N 12. P 537-552.

Lewis F.T. A further study of the polyhedral shapes of cells // *Proc. Amer. Acad.* 1925. V 61. N 1. P 1-34.

Lewis F.T. The effect of cell division on the shape and size of hexagonal cells // *Anat. Rec.* 1926. V 33. P 331-355.

Lewis F.T. Mathematically precise features of epithelial mosaics // *Anat. Rec.* 1933. V 55. P 323-341.

Lewis F.T. A geometric accounting for diverse shapes of 14-hedral cells: the transition from dodecahedra to tetrakaidecahedra // *Amer. J. Bot.* 1943a. V 30. P 74-81.

Lewis F.T., 1943b. The geometry of growth and cell division in epithelial mosaics // *Amer. J. Bot.* 1943b. V 30. P 766-776.

Lewis F.T. The geometry of growth and cell division in columnar parenchyma // *Amer. J. Bot.* 1944. V 31. P 619-629.

Lewis F.T. The shape of cell as a mathematical problem // *Amer. Sci.* 1946. V 34. P 360-369.

Хроника

“Хибинский вестник”. Еженедельная газета. № 42 (899) от 19 октября 2006 г.

ФОРМУЛЫ ЖИЗНИ

16-17 октября в Малом зале Геологического института Кольского научного центра РАН работала Всероссийская научная школа. В ее программе была обозначена лишь одна тема – Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии. Уже второй раз Геологический институт КНЦ РАН и Кольское отделение Российского минералогического общества при поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью проводят подобные занятия для студентов, аспирантов и молодых ученых нашей области и других регионов России.

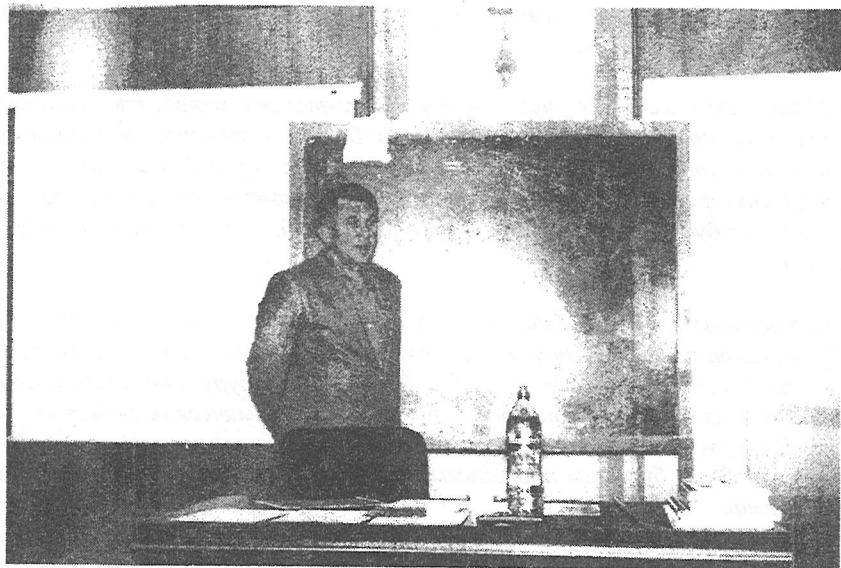
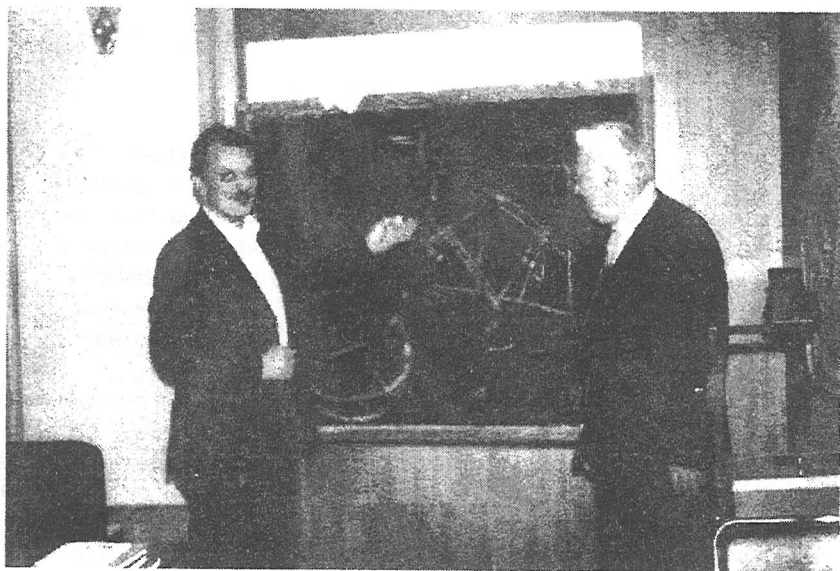
Заместитель директора Геологического института КНЦ РАН по научной работе доктор геолого-минералогических наук Юрий Вотеховский рассказал, что организация работы Всероссийской научной школы – результат деятельности созданной шесть лет назад молодежной Лаборатории математических исследований. В ней участвуют студенты Кольского филиала Петрозаводского госуниверситета и аспиранты КНЦ РАН. За эти годы они опубликовали более двух десятков научных статей в различных журналах, в том числе и зарубежных.

Заседание Всероссийской научной школы позволило молодежи послушать таких известных ученых как профессора Виталий Макаров (Математический институт РАН, Москва), Николай Заренков и Муза Раменская (Московский госуниверситет) и получить у них оценку своих научных докладов. Форум показал будущим ученым тот уровень знаний, к которому нужно стремиться.

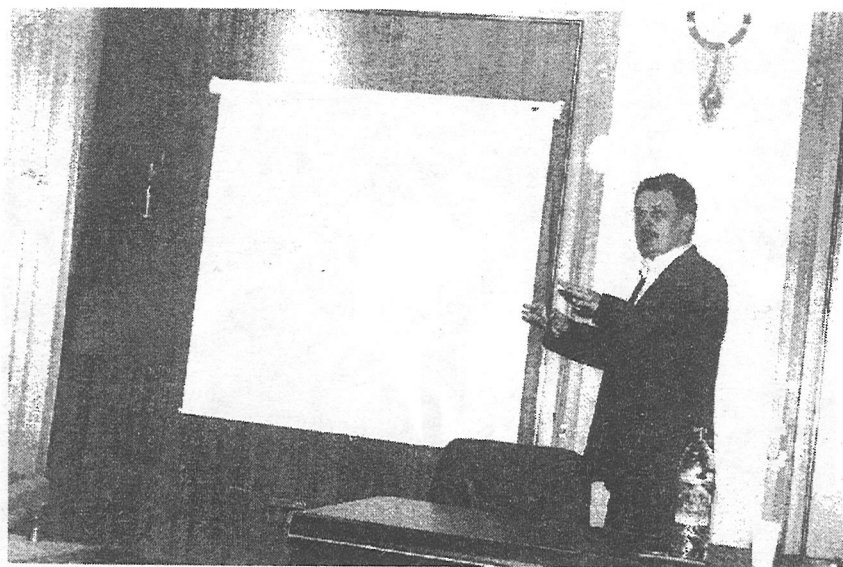
Тема, предложенная для обсуждения, имеет большой научный интерес. Природу изучают различные науки. Но точное описание можно сделать только с помощью математических методов. Изучая структуру минералов и горных пород, ученые глубже познают их физические и химические свойства. При этом обнаруживается все большее сходство с живыми организмами. Вполне вероятно, что в будущем проводимые исследования позволят вывести формулы жизни.

Татьяна Бардушко

Фотоальбом

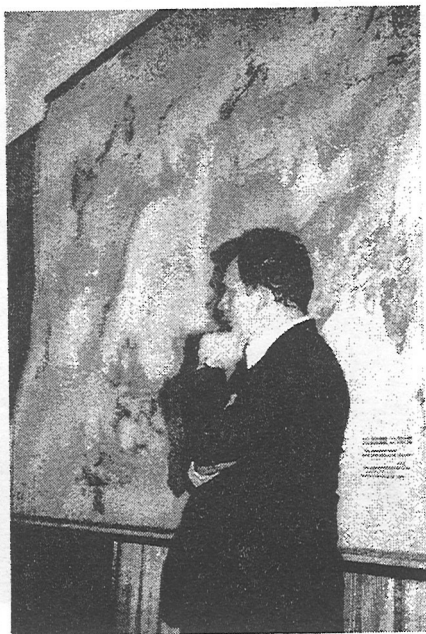
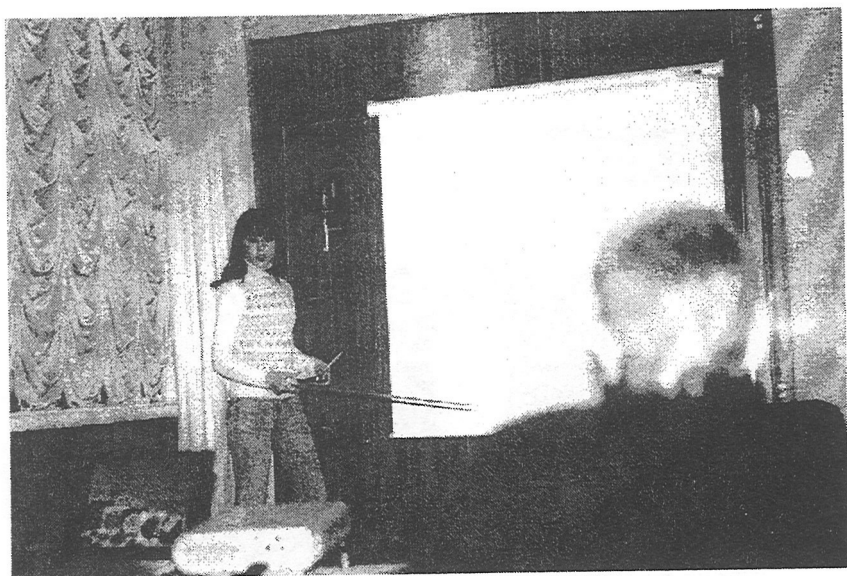














Труды II Всероссийской научной школы

*"Математические исследования в кристаллографии, минералогии
и петрографии"*

г. Апатиты, 16-17 октября 2006 г.

Научное некоммерческое издание

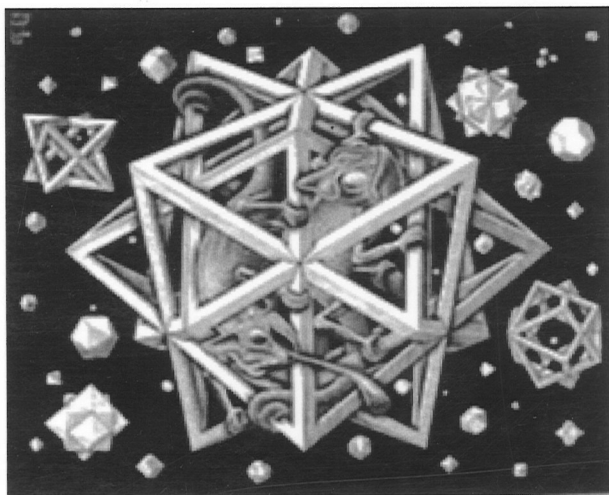
*Рекомендовано к печати Ученым советом Геологического института КНЦ РАН
и Советом Кольского отделения РМО*

*Издано при финансовой поддержке Комиссии РАН по работе с молодежью
(программа "Поддержка молодых ученых – 2006")
и Кольской научной школы Министерства образования и науки РФ
(НПШ 2305.2003.5)*

Отпечатано в ЗАО "КЭМ"

*184209 г. Апатиты Мурманской обл.
ул. Ферсмана, д. 17 а
тел./факс: (81555) 77329*

Тираж 100 экз.



Звезды (1948)

М. Эшер (1898-1972)



Рептилии (1943)