

УДК 548.0;548.1

## ПОЛИЭДРИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ СЕМИ РАЗЛИЧНЫХ СПОСОБОВ КОНДЕНСАЦИИ НЕКРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО T-УЗЛА

В. П. Мартовицкий

*T-узел, атомный кластер из 27 тетракоординированных атомов с бинарным параметром  $\Theta \approx 38^\circ$ , может быть представлен в виде полиэдров двух его подрешеток: трехцветного икосаэдра и двухцветного искаженного тетрагексаэдра. Тогда конденсация T-узлов по общим гексациклам может быть рассмотрена как объединение по серым граням одинаковых или различных полиэдров, а по трикветрам – объединение икосаэдров по цветным граням. Еще четыре возможных способа конденсации, когда центр одного T-узла становится началом следующего, вдоль направлений  $[111]$  и  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[100]$  и  $[\tau 01]$  также могут быть представлены в виде объединения двух типов полиэдров.*

T-узел – атомный кластер из 27 атомов тетраэдрической координации, каждая тройка атомов которого закручена вокруг общей связи на угол  $\Theta \approx -38^\circ$  (для правой энантиоморфной формы), является предпочтительным кандидатом по сравнению с триплетом на роль элементарного "кирпича" для построения некристаллографических регулярных структур по принципу "системы систем" [1]. Его можно представить состоящим из платоновых тел: двух тетраэдров, икосаэдра и октаэдра [2] или как три первые координационные сферы вокруг центрального атома [1]. Интересно, что хотя в этом кластере всегда имеются небольшие колебания либо в межатомных расстояниях, либо в величинах углов, тем не менее он обладает минимальным числом оборванных связей для данного числа атомов по сравнению с кластерами любых других конфигураций [3]. Попытка дальнейшего увеличения размера кластера приводит к существенным

искажениям связей [3], но можно выделить несколько направлений, вдоль которых искажения связей незначительны. Поэтому Н. А. Бульенков постулировал необходимость фрактального характера регулярных структур обобщенной кристаллографии [2], когда элемент неевклидовой геометрии может быть вложен в евклидово пространство только в виде стержня ограниченной толщины. Если принять размер  $T$ -узла за толщину этого стержня, то тогда, рассматривая различные способы конденсации  $T$ -узлов, мы можем быть уверены, что получающиеся регулярные структуры обобщенной кристаллографии будут отвечать условию минимального искажения связей.

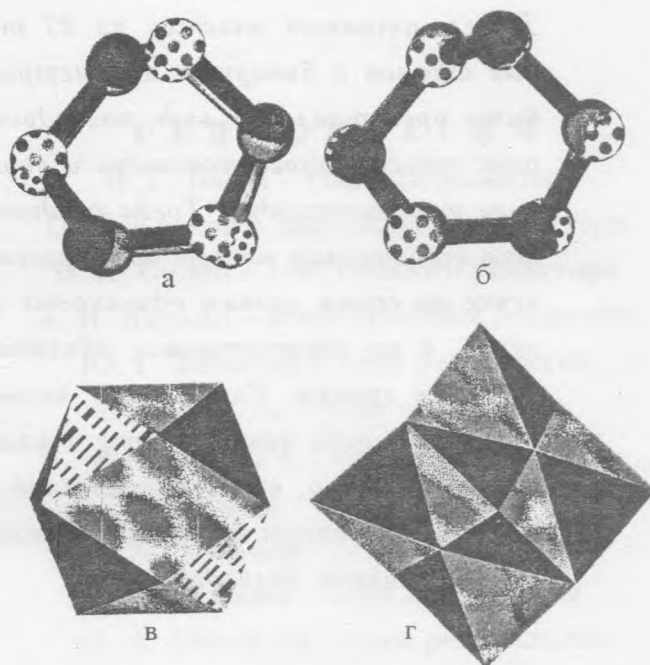


Рис. 1. Гексациклы двух объединяемых  $T$ -узлов с совпадением атомов одинаковых подрешеток (а) или различных подрешеток (б); трехцветная модель икосаэдра (в) и двухцветная модель искаженного тетрагексаэдра.

В настоящей работе в полиэдрическом изображении предложены возможные способы конденсации  $T$ -узла. Для представления  $T$ -узла в виде полиэдров нужно учитывать, что  $T$ -узел является производным от гексагональной кристаллической структуры лонсдейлита (или льда 1Н), которая, в свою очередь, состоит из двух подрешеток гексагональной плотнейшей упаковки [4]. Одна из подрешеток  $T$ -узла состоит из центрального атома и второй координационной сферы – икосаэдра, который был раскрашен в три

цвета (рис. 1в) для представления одного из способов конденсации  $T$ -узлов по общим гексациклам как объединение икосаэдров по серым граням [1]. Другая подрешетка представляет искаженный тетрагексаэдр, вершины которого составлены из атомов первой и третьей координационных сфер.

На рис. 1а, 1б показаны гексациклы двух  $T$ -узлов для различных способов их объединения по общим гексациклам, когда обобщаются атомы либо одинаковых подрешеток (рис. 1а), либо различных (рис. 1б). Тогда первый способ можно представить как конденсацию по серым граням икосаэдров. Если 24 грани искаженного тетрагексаэдра раскрасить в два цвета таким образом, чтобы вершинами серых граней были атомы, входящие в гексациклы на концах спиралей 30/11, то тогда второй способ конденсации  $T$ -узлов по общим гексациклам можно представить как объединение по серым граням различных полиэдров.

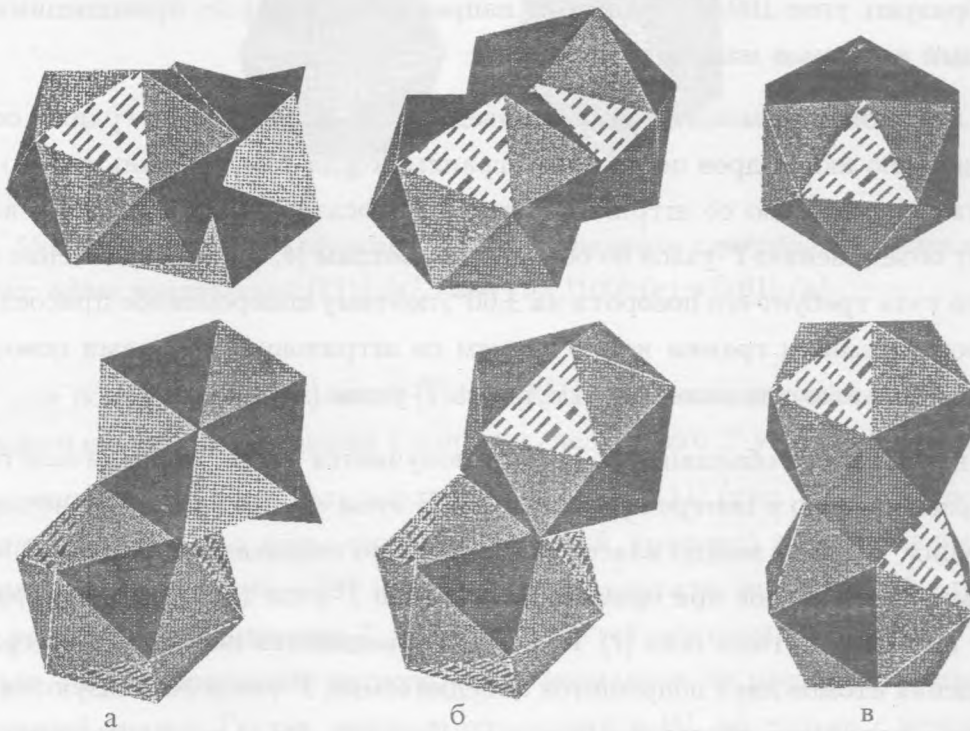


Рис. 2. Объединение икосаэдра с тетрагексаэдром (а), двух икосаэдров (б) по серым граням, а также двух икосаэдров по цветным граням (в).

Если первый икосаэдр сориентировать темной гранью в вертикальном направлении, то после присоединения к нему по серой грани полиэдра другого типа центры двух  $T$ -

узлов будут расположены примерно на одном уровне (рис. 2а, вверху), а присоединение к той же грани икосаэдра приводит к вертикальному сдвигу центра второго икосаэдра примерно на 0.45 (рис. 2б, вверху). Поскольку объединение полиэдров по серым граням является только другим способом описания конденсации  $T$ -узлов по общим спиральям 30/11, то для соблюдения преемственности с работами [2, 4, 5] и однозначного описания всех возможных вариантов объединения полиэдров, приняты следующие обозначения. Двенадцать спиралей 30/11  $T$ -узла разбиваются на четыре тройки так, что оси каждой тройки перпендикулярны к одному из направлений  $\langle 111 \rangle$ . Аналогично двенадцать серых граней икосаэдра также могут быть разбиты на четыре тройки. Только в этом случае каждые три серых грани образуют с соответствующей темной гранью углы  $70.5^\circ$ . Для исключения дублирования принято, что присоединение по серой грани возможно только справа от центра икосаэдра (рис. 2а, 2б внизу). Аналогичным образом двенадцать серых граней искаженного тетрагексаэдра разбиваются на тройки, нормали к которым образуют угол  $109.5^\circ$  с одним из направлений  $\langle 111 \rangle$ , проходящими через центр и каждый из атомов малого тетраэдра.

Третий и последний возможный способ объединения полиэдров по граням соответствует объединению икосаэдров по цветным граням, когда темная грань одного икосаэдра объединяется с гранью со штрихами другого икосаэдра (рис. 2в). Этот вариант соответствует объединению  $T$ -узлов по общим трикветрам [4, 5]. Присоединение каждого следующего узла требует его поворота на  $\pm 60^\circ$ , поэтому попеременное присоединение пар икосаэдров к темным граням или к граням со штриховкой с такими поворотами приводит к образованию алмазной структуры из  $T$ -узлов ( $\Theta = 60^\circ$ ).

Еще одна возможность объединения  $T$ -узлов получается тогда, когда начало следующего  $T$ -узла расположено в центре предыдущего. В этом случае возможны четыре способа объединения, которые можно классифицировать по индексам направлений, образуемых центрами двух  $T$ -узлов при ориентации первого  $T$ -узла так, что октаэдрические атомы лежат на координатных осях [1]. Как и для объединения икосаэдров по граням, в случае совпадения атомов двух подрешеток объединяемых  $T$ -узлов используются одинаковые полиэдры, например, икосаэдры (вдоль  $[\tau 01]$  на рис. 3г). А если совпадают атомы различных подрешеток, то тогда объединяются различные полиэдры: вдоль  $[111]$  (рис. 3а),  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  (рис. 3б) и  $[100]$  (рис. 3в). Если выставить первый полиэдр так, чтобы ось, соединяющая центры двух полиэдров, была расположена вдоль вертикального направления  $[010]$  и второй полиэдр сориентировать в параллельной ориентации с первым полиэдром для неполярных направлений  $[100]$  и  $[\tau 01]$  или развернуть его вокруг оси  $x$

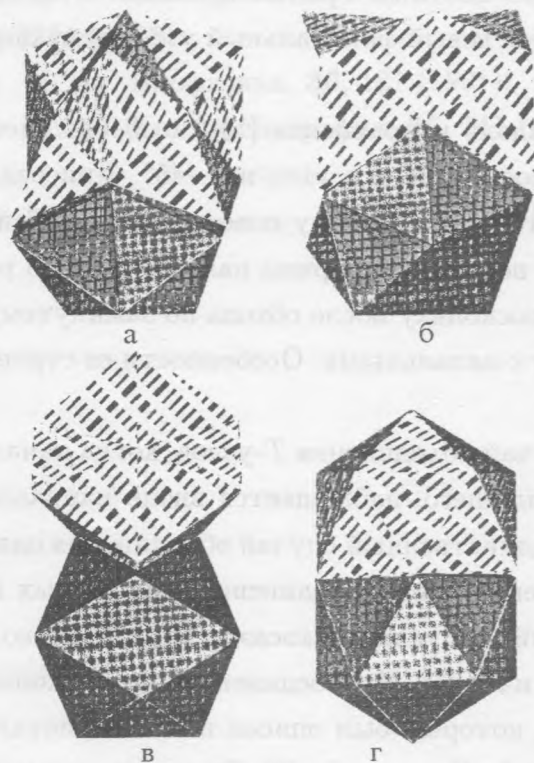


Рис. 3. Четыре способа объединения  $T$ -узлов с началом следующего  $T$ -узла в центре предыдущего: вдоль направлений  $[111]$  (а),  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  (б),  $[100]$  (в) и  $[\tau 01]$  (г).

на  $180^\circ$  для полярных направлений  $[111]$  и  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ , то можно проанализировать особенности каждого способа объединения с началом следующего  $T$ -узла в центре предыдущего.

Присоединение второго узла вдоль направления  $[111]$  (рис. 3а) с обобщением 20 атомов у двух  $T$ -узлов (то есть, они имеют общий триплет) требует поворота второго полиэдра вокруг оси  $y$  на  $-38^\circ$  или  $+82^\circ$ , в результате чего каждый атом исходного  $T$ -узла по мере присоединения  $T$ -узлов становится центром следующего  $T$ -узла. Но в сочетании с присоединением четного числа полиэдров по цветным граням образуется фрактальный аналог  $T$ -узла, впервые описанный в [5], но только с нечетным числом триплетов между  $T$ -узлами.

Объединение  $T$ -узлов через центры в направлении  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$  (рис. 3б) с обобщением 14 атомов достигается после поворота второго  $T$ -узла вокруг оси  $y$  на  $-22^\circ$  или  $+98^\circ$ . В зависимости от сочетания этих углов при последующих присоединениях образуются правые спирали  $\tilde{5}_1, \tilde{3}_1$  или левая спираль  $\tilde{5}_4$ . Этот способ объединения с присоединением

нечетного числа полиэдров по цветным граням приводит к суммарному повороту на  $+38^\circ$ . В результате, образуется левый фрактальный узел следующего уровня из правых  $T$ -узлов.

Объединение полиэдров вдоль направления  $[100]$  с обобщением 10 атомов происходит при повороте каждого последующего узла на  $-45^\circ$ . Присоединение пары  $T$ -узлов по этому алгоритму приводит к суммарному повороту на  $-90^\circ$  и возможности присоединения следующей пары в перпендикулярном направлении. В результате образуется квадратная псевдорешетка, поскольку после обхода по замкнутому циклу конечные направления осей не совпадают с начальными. Особенности ее строения будут обсуждены в другой статье.

Наиболее интересный случай объединения  $T$ -узлов, когда начало следующего  $T$ -узла расположено в центре предыдущего, наблюдается вдоль направления  $[\tau 01]$  (рис. 3г) с обобщением 14 атомов. Это единственный случай объединения одинаковых подрешеток, что позволяет представить его в виде объединения одинаковых полиэдров, например, икосаэдров. При этом каждый следующий икосаэдр относительно предыдущего должен быть повернут вокруг оси  $y$  на  $+36^\circ$ . Присоединение еще нескольких икосаэдров вдоль одной линии дает стержень, который был описан в квазикристаллической ветви обобщенной кристаллографии Н. А. Бульenkova [2]. Эти стержни могут ветвиться в пяти других направлениях  $\langle \tau 01 \rangle$ , что позволяет построить ряд промежуточных структур между тетраэдрической и квазикристаллической ветвями обобщенной кристаллографии.

Таким образом, в настоящей работе рассмотрены возможные способы конденсации некристаллографического  $T$ -узла, представленные в виде объединения полиэдров либо по граням, либо через центры.

Автор выражает глубокую признательность Н. А. Бульenkovu, без основополагающих работ которого по обобщенной кристаллографии данная работа не могла бы быть выполнена.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мартовичкий В. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, 9, 3 (2000).
- [2] Boulienkova N. A. in "Quasicrystals and Discrete Geometry", The Fields Institute Monograph Series, ed. J. Patera, Amer. Math. Soc., Providence R. J., 10, 73 (1998).

- [3] Mosseri R., DiVincenzo D.P., Sados J.F., Brodsky M.H.  
Phys. Rev., **V32**, 3974 (1985).
- [4] Бульенков Н. А. Биофизика, **36**, 181 (1991).
- [5] Бульенков Н. А. Кристаллография, **35**, 147 (1990).

Поступила в редакцию 16 июня 2000 г.