

# Граф подчинения сортов многогранников Дирихле–Вороного по принципу повышения симметрии

А. С. Поплавной<sup>а</sup>, Р. И. Филиппов<sup>б</sup>

Кемеровский государственный университет, физический факультет, кафедра теоретической физики. Россия, 650043, Кемерово, ул. Красная, д. 6.

E-mail: <sup>а</sup>popl@kemsu.ru, <sup>б</sup>blackrat@list.ru

Статья поступила 03.05.2011, подписана в печать 12.05.2011

Представлен метод построения ориентированного графа подчинения 24 сортов Делоне по принципу повышения симметрии. Данный метод позволяет найти симметрико-топологические зависимости между всеми 24 сортами.

*Ключевые слова:* сорт решетки, символ Делоне, граф подчинения, симметрия.  
УДК: 548.1.02:548.713. PACS: 61.50.Ah, 61.43.Vp.

## Введение

Многогранники Дирихле–Вороного [1], соответствующие решеткам параллельных переносов кристаллических структур, называют также ячейками Вигнера–Зейтца. Поскольку каждая решетка является одновременно и обратной решеткой для какой-либо другой решетки, множество многогранников Дирихле–Вороного (ячеек Вигнера–Зейтца) и первых зон Бриллюэна совпадают. Однако для каждой конкретной решетки многогранник Дирихле–Вороного и первая зона Бриллюэна могут существенно различаться. Например, для кубической гранецентрированной решетки многогранником Дирихле–Вороного является ромбодекаэдр, а первой зоной Бриллюэна — федоровский кубооктаэдр. Таким образом, классификации многогранников Дирихле–Вороного и первых зон Бриллюэна совпадают, но взаимные соотношения между этими классификациями довольно сложны.

Комбинаторно-симметричная классификация многогранников Дирихле–Вороного представлена в [2]. Там же приведен граф изменения типов решеток Браве при бесконечно малых деформациях, в котором отображены переходы с понижением симметрии. По такому же принципу строится схема подчинений сингоний, представленная на рис. 1. На этом рисунке обычными стрелками показаны направления понижения симметрии, которые и отражают схему подчинения сингоний. Пунктирными стрелками показаны направления повышения симметрии.

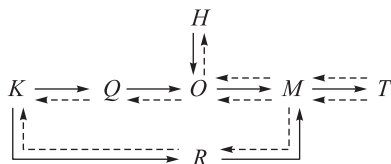


Рис. 1. Схема подчинения сингоний. Обычные стрелки отображают направления понижения симметрии. Пунктирные стрелки отображают пути повышения симметрии

Метод построения сложных кристаллических структур в виде совокупности подрешеток Браве различного типа представлен в [3]. При этом симметрия подрешеток может оказаться выше кристаллической, и эта «скрытая» симметрия проявляется в топологических особенностях спектров элементарных возбуждений [4, 5]. Для поиска высокосимметричных структур, совместимых с низкосимметричными, полезно «повернуть» схему подчинения сингоний в обратном направлении (рис. 1, пунктирные стрелки) и построить граф подчинения сортов многогранников Дирихле–Вороного по принципу повышения симметрии.

шетонок может оказаться выше кристаллической, и эта «скрытая» симметрия проявляется в топологических особенностях спектров элементарных возбуждений [4, 5]. Для поиска высокосимметричных структур, совместимых с низкосимметричными, полезно «повернуть» схему подчинения сингоний в обратном направлении (рис. 1, пунктирные стрелки) и построить граф подчинения сортов многогранников Дирихле–Вороного по принципу повышения симметрии.

	1	2	3	4	5
K					
Q					
R					
O					
M					
T					
H					

Рис. 2. 24 сорта многогранников Дирихле–Вороного [2]

### 1. Сорта решеток по Делоне

На рис. 2 представлены 24 сорта многогранников Дирихле–Вороного в соответствии с классификацией Б.Н. Делоне [2]. В каждом столбце расположены комбинаторно-одинаковые многогранники, в каждой строке — одинаковые по симметрии (голоэдри).

Сорт решетки напрямую связан с ее приведенным репером через попарные скалярные произведения. Пусть  $a, b, c$  — векторы приведенного репера (репера, построенного на трех последовательных минимумах решетки). Введем четвертый вектор  $d = -(a + b + c)$ . Из этих четырех векторов можно составить шесть различных попарных произведений:  $(a, b), (a, c), (a, d), (b, c), (b, d), (c, d)$ . Эти шесть параметров Зеллинга для удобства записывают на ребрах тетраэдра, построенного на концах векторов  $a, b, c, d$  (рис. 3). Каждый сорт решетки накладывает ограничения в виде неравенств на эти скалярные произведения. Если использовать обычные геометрические обозначения для равенств ребер (параметров) в виде штрихов и добавить специальное обозначение на равенство нулю в виде выколотой точки, то сорт можно записать в удобном и компактном представлении, называемом символом Делоне (рис. 4).

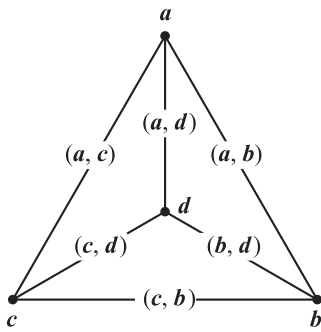


Рис. 3. Размещение шести скалярных произведений на тетраэдре

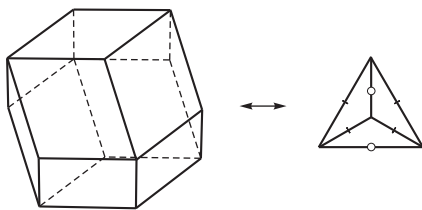


Рис. 4. Символ Делоне, соответствующий сорту K3

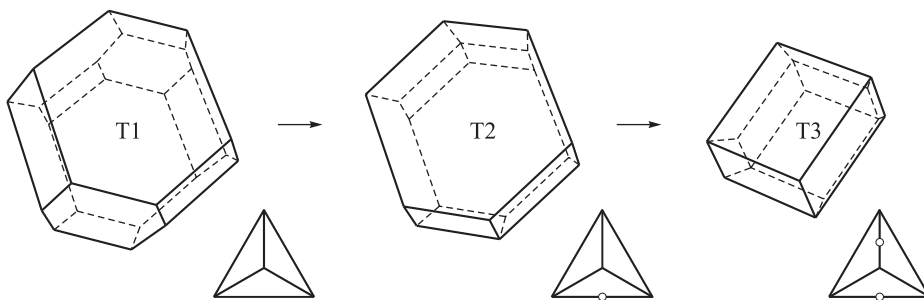


Рис. 5. Среди множества значений сорта T1 есть значения, удовлетворяющие T2; в множестве T2 есть значения T3

Неравенства, которые записываются на символе, определяют область допустимых значений для шести параметров Зеллинга. Самым «свободным» символом Делоне является символ для сорта T1 без ограничений на параметры Зеллинга. Среди его множества допустимых значений найдутся такие, которые будут отвечать символам Делоне для других сортов (рис. 5).

В таком случае будем говорить, что из сорта T1 можно перейти к сорту (символу) T2, а из T2 в T3 соответственно. Указанные переходы идут в направлении повышения симметрии, и тем не менее здесь можно усмотреть аналогию с подчинением сингоний и пространственных групп, в которых критерием подчинения являются отношения группа–подгруппа — т.е. указывается переход от множества с большим числом элементов к множеству с меньшим. То же самое имеет место и в нашем случае, где направление перехода идет от множества без ограничений на параметры к множествам с увеличивающимся числом ограничений.

### 2. Построение графа

Очевидно, что сорт T1 содержит в себе все возможные сорта, т.е. непрерывно изменяя параметры Зеллинга на символе Делоне для T1, можно перейти в любой из 24 сортов. Также очевидно, что, выбрав произвольную пару символов Делоне, не всегда можно совершить переход от одного выбранного сорта к другому. Примером такой пары может служить пара T3–H4: нули на символах расположены топологически по-разному. Воспользуемся следующим представлением для символа Делоне, которое удобно для программирования: запишем все шесть условий символа в определенном порядке в виде массива и будем использовать для записи 0 — если параметр Зеллинга должен быть равен нулю, n — если параметр принадлежит группе n, с определенным значением для всех параметров (рис. 6). Если на ребре нет условия, то ребро образует группу с уникальным числом.

Чтобы определить возможность перехода между выбранными сортами, нужно записать их соответствующие массивы один над другим и определить переходы между числами. Очевидно, что если число a из одного массива переходит в число b другого, то все числа a должны переходить в b. Добавив условие перехода 0 → 0 (ноль может переходить только сам в себя), получаем простой алгоритм проверки совместности двух сортов. Здесь стоит заметить, что запись символа Делоне в виде массива неоднозначна, и, если учесть

**Возможные переходы для всех 24 сортов**

	1		2		3	4	5
<i>K</i>	—				—		—
<i>Q</i>	<i>K1, K3</i>		<i>K3</i>				<i>K5</i>
<i>R</i>	<i>K1, K5</i>				<i>K3</i>		
<i>O</i>	<i>Q1, Q2</i>	<i>Q1, O3</i>	<i>O3, Q2</i>		<i>K3</i>	<i>Q5, H4</i>	<i>Q5</i>
<i>M</i>	<i>M2<sub>2</sub>, M3, O1<sub>1</sub>, O1<sub>2</sub></i>	<i>M2<sub>2</sub>, O1<sub>1</sub>, O4, O2, R1</i>	<i>M3, O2, O4</i>	<i>O3, Q2, Q5</i>	<i>O3, R3</i>	<i>O4, O5</i>	
<i>T</i>	<i>T2, M1<sub>1</sub>, M1<sub>2</sub></i>		<i>T3, M2<sub>1</sub>, M2<sub>2</sub>, M4</i>		<i>M3, O5</i>		
<i>H</i>						—	

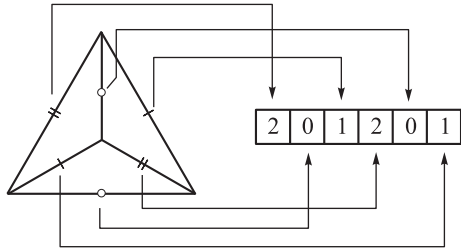


Рис. 6. Запись символа Делоне для сорта *O3*

все возможные вращения и зеркальные отражения, то существует 24 возможных записи, каждую из которых необходимо проверить в вышеописанной процедуре.

Построив все возможные переходы между сортами (которые к тому же будут носить однонаправленный характер), мы получим, выражаясь математически, матрицу смежности для ориентированного графа. Определим «лишнюю» связь  $S1 \rightarrow S3$  как переход между двумя сортами  $S1$  и  $S3$ , который можно осуществить через промежуточный сорт  $S2$ . Другими словами, среди множества допустимых значений сорта  $S1$  есть значения, удовлетворяющие сорту  $S2$ , а в множестве значений сорта  $S2$  есть значения, принадлежащие сорту  $S3$ .

Обозначим текущий граф сортов как  $G$ . Поступим следующим образом: найдем все узлы в  $G$ , в которых отсутствуют переходы из других узлов. Будем называть такие узлы начальными. Найдем все «не лишние» связи, выходящие из начальных узлов, и добавим их к новому пустому графу  $G'$ . Так как в начальные сорта невозможно перейти из других, то исключим их из  $G$ , после чего повторим всю операцию для  $G$ . В результате будет построен новый граф  $G'$ , содержащий только «не лишние» связи. В таблице приведены возможные переходы для каждого из сортов, найденные по приведенному алгоритму. Нумерация сортов в этой таблице соответствует нумерации на рис. 2. Сорта  $K1, K3, K5$  и  $H4$ , как это видно из рис. 2, являются конечными и для них не существует возможных переходов.

Даже с таким небольшим количеством связей итоговый граф выглядит достаточно запутанным, поэтому разобьем его по конечным узлам графа, из которых не существует переходов (рис. 7).

**Заключение**

В работе приведена идея алгоритма построения графа подчинения сортов. Данный алгоритм был реализован на языке программирования python с использованием вспомогательных библиотек программирования, которые реализуют оригинальные методики из работы [1]. Результаты, представленные на рис. 7, могут быть полезными при поиске высокосимметричных структур в низкосимметричных, в частности при нахождении трансляционно-совместимых подрешеток разного типа Браве в кристаллах сложного состава [3].

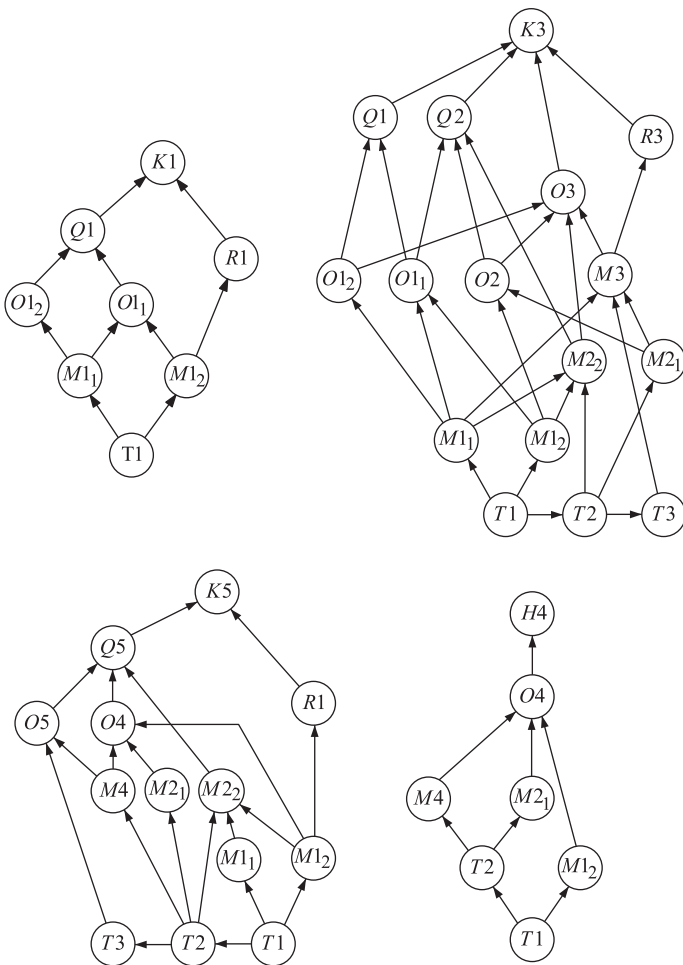


Рис. 7. Итоговый граф, разбитый по конечным узлам переходов ( $K1, K3, K5, H4$ )

**Список литературы**

1. Делоне Б.Н., Галиулин Р.В., Штогрин М.И. Теория Браве и ее обобщение на  $n$ -мерные решетки // Браве О. Избранные труды. Л., 1974.
2. Галиулин Р.В. // Кристаллография. 1984. **29**, № 4. С. 638.
3. Поплавной А.С., Силинин А.В. // Кристаллография. 2005. **50**, № 5. С. 782.
4. Поплавной А.С. // Материаловедение. 2005. № 9. С. 2.
5. Поплавной А.С. // Изв. вузов. Физика. 2008. **59**, № 7. С. 31.

**Dependency graph for Dirichlet–Voronoi polyhedra in terms of increasing symmetry****A. S. Poplavnoi<sup>a</sup>, R. I. Filippov<sup>b</sup>***Department of Theoretical Physics, Faculty of Physics, Kemerovo State University, Kemerovo 650043, Russia.**E-mail: <sup>a</sup>popl@kemsu.ru, <sup>b</sup>blackrat@list.ru.*

A method for constructing dependency graph of 24 Delaunay's sorts in terms of increasing symmetry is presented. This method allows one to find symmetric-topological dependencies between all this 24 sorts.

*Keywords:* sort of lattice, Delaunay's symbol, dependency graph, symmetry.

PACS: 61.50.Ah, 61.43.Vn.

*Received 3 May 2011.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 6(2011).

**Сведения об авторах**

1. Поплавной Анатолий Степанович — докт. физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой; тел.: (3842) 58-31-95, e-mail: popl@kemsu.ru.
2. Филиппов Роман Игоревич — аспирант; e-mail: blackrat@list.ru.