*А.П. Клишин, С.В. Руднев*

# ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Одним из направлений исследований в кристаллофизике и физике твердого тела является детальное изучение микроструктуры на нанокристаллическом уровне: разделение поверхностных и объемных эффектов, обусловленных размерами зерен и границами раздела; определение условий стабилизации кристаллической структуры; создание новых кристаллогеометрических моделей, позволяющих более точно описывать реальные структуры. В связи с рассмотрением действий различных сил в замкнутых, многомерных поверхностях, а также классических проблем кристаллофизики, таких как зональность и секториальность кристаллической структуры, задание границ раздела, трудности с энергетическим расчетом простейших кристаллических структур, появились новые модели и подходы к строению кристалла геометрического плана, так как до сих пор не найдено геометрии, которая удобно бы сочетала микроструктуру идеального кристалла с его внешней симметрией.

В настоящей работе будем придерживаться неевклидового подхода к построению моделей кристаллических структур в эллиптическом пространстве Римана, который разрабатывается в работах [1, 2]. Внутреннее пространство реального кристалла полагается удовлетворяющим геометрии ограниченного, замкнутого с эллиптической метрикой пространства. Одной из важных проблем при этом будет реализация федоровских групп ($F$-групп)в эллиптическом пространстве, и визуальная интерпретация решеток в $E\,3$ (евклидово пространство).

## Проблема реализации (представления) $F$-групп в пространстве Римана ($V4$)

Геометрии, в малых частях совпадающие с $E2$ и $E3$, рассматривались У. Клиффордом уже в конце XIX в. Была исследована связь межу геометриями и равномерно разрывными группами движения пространства. К настоящему моменту известно несколько работ [3, 4], в которых используются различные доказательства (топологического характера), представления $F$-групп в сферической геометрии Римана и геометрии Лобачевского. Цель данной работы заключается в получение наиболее естественного (в рамках теории групп) доказательства представимости $F$-групп в эллиптической геометрии Римана.

В геометрической кристаллографии евклидова пространства ($E3$) обычно рассматриваются дискретные группы движений некоторого особого вида, $F$-группы, которые удовлетворяют следующим условиям:

существует хотя бы одна точка $\boldsymbol{A}$ пространства, изолированная в классе $\{A_F\} = \{f(A) \mid f \in F\}$ эквивалентных ей точек, т. е. существует достаточно малый радиус $r$ (радиус дискретности точки $\boldsymbol{A}$), такой, что шар $\omega = \omega\,(r,\, f(A))$, имеющий центр в точке $f(A)$ орбиты точки $\boldsymbol{A}$, содержит единственную точку этой орбиты – центр шара;

существует хотя бы одна такая точка $\boldsymbol{B}$ пространства, что класс эквивалентных ей точек расположен в пространстве однородно относительно заданной топологии пространства, т. е. существует достаточно большой радиус $R$, что внутри любого шара $\omega$ этого радиуса найдется эквивалентная $\boldsymbol{B}$ точка.

Требования *a, b,* накладываемые на $F$-группу, весьма естественны и пригодны для представления структур кристаллов в неевклидовых пространствах.

В геометрии Римана ($V4$) логично сохранить термин "федоровская группа" ($F$-группа) для дискретных групп движений, удовлетворяющих условиям *a, b.*

## Представления $F$-групп

Поскольку максимальная размерность $F$-групп в $E3$ равна трем, то для интерпритации в $V4$ достаточно взять трехмерное проективное пространство $R(p^3)$ как пространство параметров $F$-групп. Используем известную теорему теории групп [3]:

Группа SO(3) является гомоморфным образом группы $SU(2)$ при гомоморфизме $\Phi{:}g \to \Phi g$. Каждое вращение из $SO(3)$ отвечает ровно двум унитарным операторам $g$ и $-g$ из $SU(2)$, где $SO(3)$ – группа собственных вращений в $E3$, $SU(2)$ – унитарная группа операторов g вида:

$$g = \begin{Vmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{Vmatrix} \in SU(2), \quad \|\alpha\|^2 + \|\beta\|^2 = 1,$$

$$\Phi_g^+ : H_x \to g H_x g^{-1},$$

где $$H_x = \begin{Vmatrix} x_3 & x_1 + i\,x_2 \\ x_1 - i\,x_2 & -x_3 \end{Vmatrix}.$$

Таким образом, легко видеть, что $SO(3)$ топологически эквивалентна $R(p^3)$. Группа $SU(2)$ находится в биективном соответствии с точками сферы $S^3$. Линейным операторам $\pm g \in SU(2)$ отвечают пары диаметрально противоположных точек на $S^3$, причем точки пары при гомоморфизме склеиваются. Вводя эллиптическую метрику на $S^3$, легко получить *V4*. Отсюда следует что, вышеуказанной процедурой в проективном пространстве $R(p^3)$ и *V4* индуцируется действие группы *SO(3)*. Или, иначе, в *V4* устанавливается структура *F*-групп.

Используя эпиморфизм, $\Phi$: $SU(2) \to SO(3)$, можно описать *F*-группы в матричном виде, как подгруппы группы *SU(2)*. Возникают так называемые бинарные группы:

$$D_n^* = \Phi^{-1}(D_n),\quad T^* = \Phi^{-1}(T),\quad Q^* = \Phi^{-1}(Q),$$

$$I^* = \Phi^{-1}(I),$$

бинарная группа диэдра, бинарная группа тетраэдра, бинарная группа октаэдра, бинарная группа икосаэдра. Бинарные группы, равно как и ортогональные представления в целом, возникают естественным образом при описании физической системы со спином и в расчетах характеристик гравитационных полей в римановых пространствах.

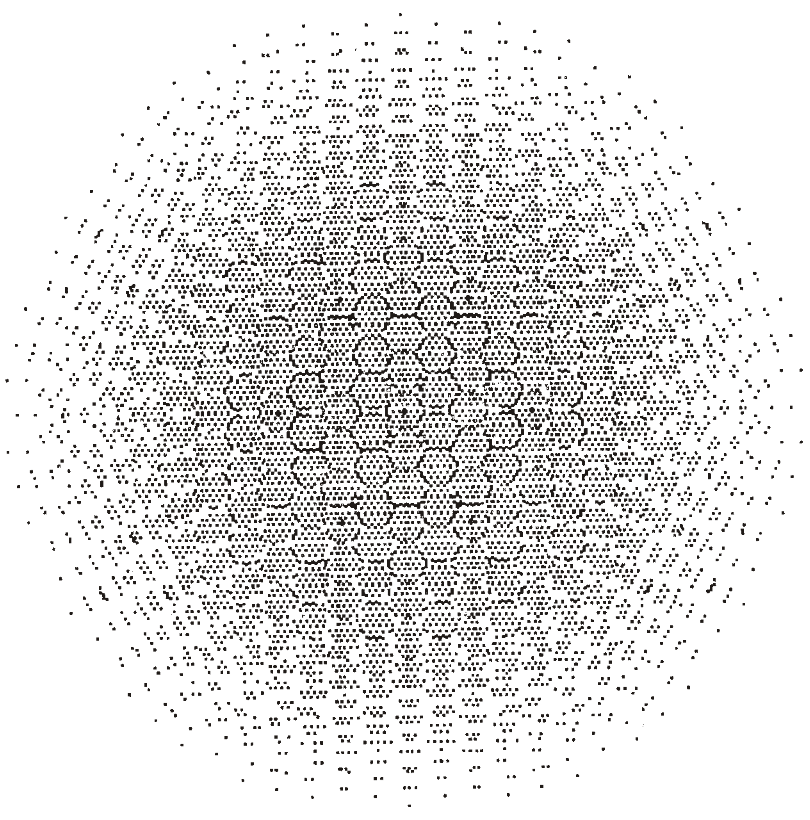

Рис.1. Блочное строение (идеальная система) в сечении, перепендикулярном оси *(L6)*

Используя предлагаемый подход, авторы построили точечные системы (рис. 1.), моделирующие расположение узлов решетки в некоторых специальных сечениях идеальных структур. Сравнения полученных результатов с данными рентгеноструктурного анализа и электронограмм показали удовлетворительное соответствие идеальных систем и реальных распределений атомов в решетках.

## Литература


1. Руднев С.В., Ермолаев В.А. Применение эллиптической геометрии Римана к изучению кристаллических структур // Геометрический сборник. – Томск: ТГУ, 1983. – С. 113–121.
2. Rudnev S.V. // Comput. Math. Appl. 1988. V. 6. P. 597–616.
3. Галиулин Р.В. Идеальные кристаллы в пространствах постоянной кривизны // Кристаллография. 1994. Т. 39. N 4. С. 381–385.
4. Макаров М.С. Геометрические методы построения дискретных групп движений пространства Лобачевского. // Проблемы геометрии. 1983. Т. 15. С. 3–59.
5. Сергеев А.Н., Руднев С.В., Бамбуров В.Г., Швейкин Г.П. // ДАН СССР, 1995. Т. 4. С. 499–501.
6. Желобенко Д.П. Компактные группы Ли и их представления. М.: Наука, 1970.