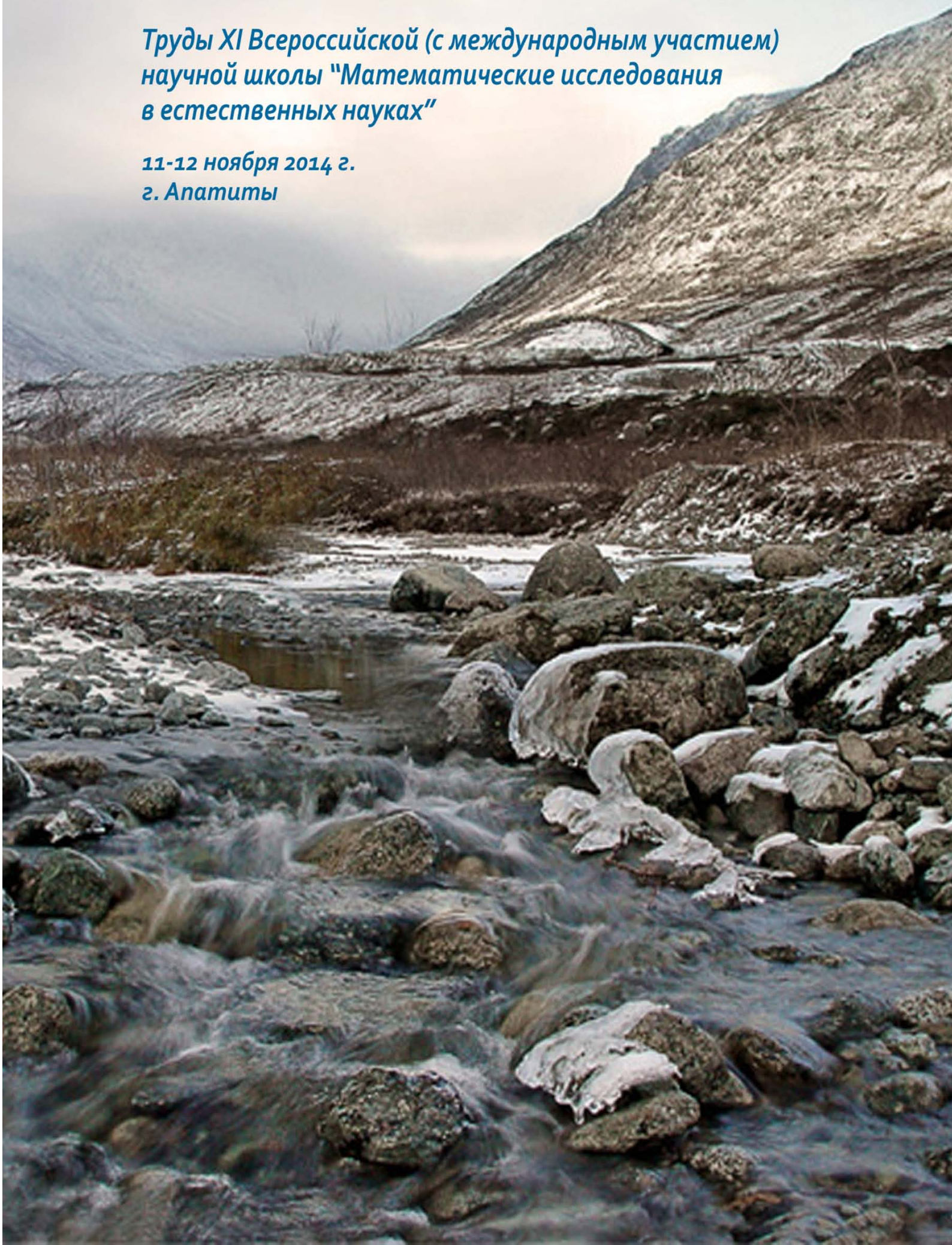


*Труды XI Всероссийской (с международным участием)
научной школы "Математические исследования
в естественных науках"*

*11-12 ноября 2014 г.
г. Апатиты*



*Геологический институт КНЦ РАН
Кольское отделение и
Комиссия по истории РМО*

*Труды XI Всероссийской
(с международным участием) научной школы
“Математические исследования
в естественных науках”*

Апатиты, 11-12 ноября 2014 г.



Апатиты, 2014

УДК 548.12 + 549.21
ISSN 2074-2487

Математические исследования в естественных науках. Труды XI Всероссийской (с международным участием) научной школы. Апатиты, Геологический институт КНЦ РАН, Кольское отделение и Комиссия по истории РМО, 11-12 ноября 2014 г. / Научн. ред. Ю.Л. Войтеховский. – Апатиты: Изд-во К & М, 2014. - 300 с.

В сборнике представлены материалы XI Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках», состоявшейся в Геологическом институте КНЦ РАН, г. Апатиты, 11-12 ноября 2014 г. при поддержке Кольского отделения и Комиссии по истории Российского минералогического общества. В секциях «Математика и кристаллография», «Геология и геофизика», «Биология» с разных сторон рассматривались проблемы описания сложных природных систем, их математического моделирования. Издание представляет интерес для геологов широкого профиля и студентов геологических специальностей.

Научное издание рекомендовано к печати Учёным советом Геологического института КНЦ РАН и Советом Кольского отделения РМО.

Электронная версия: <http://geoksc.apatity.ru>

Научный редактор: проф., д.г.-м.н. Ю.Л. Войтеховский
Компьютерный дизайн: Л.Д. Чистякова, Н.А. Мансурова
Фоторепортаж: Н.А. Мансурова, С.А. Хитров

© Коллектив авторов, 2014

© Российское минералогическое общество, Кольское отделение и Комиссия по истории, 2014

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Геологический институт Кольского научного центра Российской академии наук, 2014

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

11-12 ноября 2014 г. в Геологическом институте КНЦ РАН прошла XI Всероссийская (с международным участием) научная школа «Математические исследования в естественных науках». Информационная и организационная поддержка оказана Кольским отделением и Комиссией по истории РМО. В течение двух дней на секциях «Математика и кристаллография», «Геология и геофизика», «Биология» заслушаны 12 докладов. Примерно столько же заочных докладов принято к публикации. Авторы – научные сотрудники и аспиранты институтов РАН и университетов из Апатитов, Благовещенска, Владимира, Донецка, Екатеринбурга, Москвы, Омска, Петрозаводска, Санкт-Петербурга, Сыктывкара. Тем самым подтверждён всероссийский (с международным участием) статус школы. Её работу завершила активная дискуссия. Как и в предыдущие годы, школа была ориентирована на поиск универсальных, междисциплинарных, пограничных подходов в естественных науках. Именно поэтому в большинстве докладов с разных сторон рассматривались вопросы классификаций, описания сложных природных систем, их математического моделирования, в том числе динамического. Конференция приняла следующее решение:

1. Считать XI Всероссийскую (с международным участием) научную школу «Математические исследования в естественных науках» проведённой на должном научном и организационном уровне.
2. Издать Труды XI Всероссийской (с международным участием) научной школы «Математические исследования в естественных науках» в виде сборника статей.
3. Опубликовать информацию о XI Всероссийской (с международным участием) научной школе «Математические исследования в естественных науках» на сайтах Геологического института КНЦ РАН и Российского минералогического общества, а также в средствах массовой информации гг. Кировск и Апатиты.
4. Провести XII Всероссийскую (с международным участием) научную школу «Математические исследования в естественных науках» в Геологическом институте КНЦ РАН в октябре-ноябре 2015 г.

Во исполнение п. 2 решения конференции по материалам очных и заочных докладов издан настоящий сборник. Надеюсь, он будет полезен читателям и привлечёт к участию в последующих школах молодых учёных, тяготеющих к точному знанию в естественных науках.

Войтеховский Ю.Л.

директор Геологического института КНЦ РАН

председатель Кольского отделения и Комиссии по истории РМО

проф., д.г.-м.н.

**МАТЕМАТИКА И
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ**

ОПЫТ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ОТНОШЕНИЙ ОБЪЕКТОВ НИЖНИХ УРОВНЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ МАТЕРИИ

Бобков А.И.

Российский государственный геологоразведочный университет, Москва,
bobkov-ai@tochka.ru

На основе математического исследования выявлены прогрессивно-последовательные отношения ядер, атомов, молекул, химических соединений и смесей веществ. Установленные закономерности могут служить основой для построения общей классификации объектов нижних уровней дискретной организации материи.

Глубокое единство материального мира, несмотря на специфику различных уровней организации материи, делает оправданными попытки построения тех или иных общих классификаций объектов различных структурных уровней.

Целесообразность создания общей классификации микрочастиц сомнений не вызывает. Неоднозначным является лишь отношение к своевременности попыток ее построения. Так, В.И. Семишин считает, что «намечаются пути ... создания реальной всеобщей системы фундаментальных частиц, ядер, элементов и антиэлементов» [5]. Д.Н. Трифонов хотя и не исключил возможность построения такой системы, но нашел это преждевременным. Говоря о попытках некоторых ученых «расширить» периодическую систему Д.И. Менделеева за счет включения в нее нейтрона и других элементарных частиц, он замечает: «Подобная «надстройка» выглядит ныне искусственной, она явилась лишь результатом стремления отдельных ученых разработать некую единую систематику дискретных материальных образований природы... Быть может, такая систематика когда-нибудь и будет создана...» [6]. Тем не менее, такие попытки продолжаются. Например, Б.Ф. Махов [8] включил свободный нейтрон и «мировой эфир» (околоядерную среду) в нулевую диаду предложенной им симметричной квантовой периодической системы нейтральных атомов.

Условность границ между природными и искусственными химическими соединениями приводит к идее построения их общей классификации. Г.Б. Бокий [3] рассмотрел перспективу создания естественной классификации химических соединений, включая минералы. Т.Г. Петров и Н.И. Краснова [4] предлагают использовать разработанный ими способ систематизации химических составов минералов при классификации горных пород, а также «для упорядочения химических составов объектов в других отраслях науки и технологии, в частности, при систематизации исходных материалов и их продуктов, будь-то особо чистых веществ, сплавов, стекол, композитных материалов и многих других».

В данной статье рассматриваются результаты математических исследований автором периодической системы элементов (ПСЭ) Д.И. Менделеева, которые могут быть использованы при разработке основ общей прогрессивно-последовательной классификации объектов как одного уровня (органические и неорганические химические соединения и минералы), так и разных уровней (ядра, атомы, молекулы, химические соединения, смеси веществ) [2].

От периодической системы элементов к их прогрессивно-последовательной классификации

Для исследований выбрана сверхдлинная форма таблицы ПСЭ, строки и столбцы элементов которой совпадают с приведенными в табл. 1. Абстрагируемся от физического смысла такой формы ПСЭ. Перед нами таблица значений Z (аппликат). Требуется найти соответствующие значения абсцисс (X) и ординат (Y), а также саму функцию. Решение приведено в табл. 1, которая отражает также физическую интерпретацию результатов. В итоге мы, полностью сохранив химические и электронные аналогии элементов, переходим от ПСЭ к прогрессивно-последовательной классификации (ППКЭ). В ППКЭ аналогами периода и группы ПСЭ являются прогрессии Y и последовательности X . Названия прогрессия и последовательность по арифметическим прогрессиям и числовым последовательностям, которые образуют значения Z , соответственно, элементов строки и столбца (табл. 1).

Для любого Z существует присущая только ему пара значений величин X и Y , таких, что

$$Z = X + Y \quad 1$$

Это обеспечивает однозначность мест химических элементов в ППКЭ. X принимает значения 0, -1, -2, -3... С учетом размерности, Z можно рассматривать как *дефицит заряда или протонов* в ядре с данным Z . Дефицит заряда является разностью зарядов данного ядра и ядра-эталона, обладающего максимальным зарядом в той же прогрессии. При этом ядра-эталон имеют нулевой дефицит заряда. Элементы с равными значениями X образуют *последовательность*. Последовательности химических элементов объединяются в серии последовательностей А, В, С, D, которые в целом представлены соответственно s -, p -, d -, f -элементами.

Y для ядер атомов химических элементов принимает значения 2, 4, 12, 20, 38, 56, 88, 120. Это *критический заряд* (и критическое число протонов в ядре), являющийся мерой, превышение которой приводит к переходу ядра данного рода в ядро другого рода. Элементы с равными значениями Y составляют *прогрессию*. Она делится на *субпрогрессии* с закономерно изменяющимся суммарным дефицитом заряда:

$$X_j = -(2j - 1)^3 \quad 2$$

где j – порядковый номер субпрогрессии в прогрессии.

Субпрогрессии состоят соответственно возрастанию их номера j в основном из s -, p -, d -, f -элементов. В силу (2) они не имеют вариантов. Для примера сравним суммарный дефицит заряда ядер элементов в лантаноидах в ПСЭ: Се – Lu и La – Yb. Им соответствует 4-я субпрогрессия ($j = 4$) 88-й прогрессии ППКЭ (табл. 1). Сумма X элементов семейства в первом варианте равна -329, во втором -343. Для соответствующей им субпрогрессии имеем $X_4 = -(2 \cdot 4 - 1)^3 = -343$. Субпрогрессия по этому критерию совпала со вторым вариантом лантаноидов. Учитывая, что с атома Lu начинается систематическая застройка d -подоболочки, в то время как появление d -электрона у La аномально, результат сравнения оказывается в пользу 2-го варианта ПСЭ или 4-й субпрогрессии 88-й прогрессии ППКЭ.

Закон изменения заряда частиц нулевой последовательности

Ядра-эталон, как было отмечено выше, не имеют дефицита заряда ($X = 0$). В этом случае из выражения (1) следует, что у них $Y = Z$. Это ядра He, Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra... Они относятся к *нулевой последовательности частиц*, заряды которых используются для определения дефицита заряда X и критического заряда Y ядер остальных элементов. Рассмотрим заряды Z ядер-эталон в качестве членов числовой последовательности 2, 4, 12, 20, 38, 56, 88... Зная первые семь членов последовательности по рекуррентной формуле (3), можно вычислить любое количество ее членов: 120, 170, 220...

$$Z_m = Z_{m-7} + Z_{m-6} - Z_{m-1} - 3(Z_{m-5} + Z_{m-4} - Z_{m-3} - Z_{m-2}) + 16 \quad 3$$

Те же значения Z , взятые в порядке их убывания, являются членами числовой последовательности 88, 56, 38, 20, 12, 4, 2... По формуле (4) можно вычислить также любое число других членов последовательности: 0, 0, 0, -2, -4, -12, -20, -38, -56, -88, -120, -170, -220...

$$Z_m = Z_{m-7} + Z_{m-6} - Z_{m-1} + 3(Z_{m-3} + Z_{m-2} - Z_{m-5} - Z_{m-4}) - 16 \quad 4$$

Из полученного ряда значений зарядов прежде всего следует, что между ядрами гелия ($Z = 2$) и антигелия ($Z = -2$) в нулевой последовательности частиц располагаются три субъядерные частицы с нулевым электрическим зарядом. Наиболее подходящими на эту роль являются антинейтрон, фотон и нейтрон. Место частицы в нулевой последовательности обозначим ее ординальным (порядковым) числом n , которое принимает для частиц этой последовательности значения ..., -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3... При этом фотон имеет $n = 0$. Ординальные числа n и заряды Z частиц нулевой последовательности приведены в табл. 2.

Заряд частицы нулевой последовательности связан с ее ординальным числом

$$Z_n = \frac{n^3}{6} + n \left[\frac{1}{2} \left(\sin^2 \frac{1}{2} \pi (n-1) \right) - \frac{1}{6} \right] \quad 5$$

Характеристики гипотетических частиц выделены в таблице курсивом. Результаты вычисления по формуле (5) подтверждают, что между ядром гелия и антигелия в нулевой последовательности частиц находятся три элементарные частицы с нулевым зарядом. Установленная закономерность названа *законом изменения заряда частиц нулевой последовательности* [3]. Она позволяет прогнозировать эталонные ядра атомов гипотетических элементов в так называемых островках относительной стабильности. Анализ связей зарядов частиц нулевой последовательности позволяет также сделать следующие выводы:

1. Заряды частиц нулевой последовательности являются *четными и противоположными* (последний вывод совпадает с известными представлениями о симметрии свойств частиц и античастиц), т. е. каждая частица рассматриваемой последовательности должна иметь античастицу с противоположным зарядом. Для фотона свойства частицы и античастицы совпадают.

2. Заряд четной частицы равен среднему арифметическому из зарядов смежных нечетных частиц

$$Z_n = \frac{Z_{n-1} + Z_{n+1}}{2} \quad 6$$

где n – четное ординальное число. Заряд нечетной частицы смещен на n единиц заряда относительно среднего арифметического из зарядов соседних частиц с четными значениями n

$$Z_n = \frac{Z_{n-1} + Z_{n+1}}{2} - n \quad 7$$

где n – нечетное ординальное число.

3. Нулевая последовательность частиц представляет собой закономерно чередующиеся семейства, состоящие из трех (триплеты) и одной (синглеты) частиц (табл. 2). Заряды частиц триплетов тетрактратны (кратны 4), синглетов – атетрактратны (не кратны 4). Заряды частиц четных триплетов четнотетрактратны, т. е. частное – четное число, а нечетных триплетов – нечетнотетрактратны (частное – нечетное число).

Средний член любого триплета имеет четное ординальное число. Из (6) следует, что сумма зарядов частиц триплета равна утроенному заряду второй частицы триплета (12) и наоборот, заряд второй частицы триплета равен трети суммарного заряда (10).

Приращение заряда (ΔZ) частиц триплета определяется выражением

$$\Delta Z = 8t^2 \quad 8$$

Заряд первого члена триплета

$$Z_{t1} = \frac{4}{3}t(8t^2 + 1) - 8t^2 \quad 9$$

Заряд второго (среднего) члена триплета

$$Z_{t2} = \frac{4}{3}t(8t^2 + 1) \quad 10$$

Заряд третьего члена триплета

$$Z_{t1} = \frac{4}{3}t(8t^2 + 1) + 8t^2 \quad 11$$

Суммарный заряд частиц триплета

$$Z_t = 4t(8t^2 + 1) \quad 12$$

Эти сведения о триплетах подтверждают, что между первым (нечетным) и минус первым (нечетным) триплетами должен находиться нулевой (четный) триплет с $t = 0$, состоящий из трех частиц с нулевыми зарядами. Формулы (8) – (12) справедливы и при $t = 0$. Более полная информация о синглетах и триплетах числовой последовательности (3-5) дана в [3]. Из (1) следует, что у любой n -частицы нулевой последовательности ($X = 0$) заряд совпадает с критическим ($Z_n = Y_n$). Следовательно, закон изменения заряда частиц нулевой последовательности отражает закономерность изменения критического заряда ядер химических элементов и антиэлементов.

Заряд 0Z_Y частицы нулевой последовательности, используемый как эталон, позволяет определить X и Y ядра атома любого элемента с зарядом ядра Z атома из той же прогрессии.

$$\text{Если } Z_{n-1}^0 < Z \leq Z_n^0, \text{ то } X_Z = Z - Z_n^0 \text{ и } Y_Z = Z_n^0 \quad 13$$

Данная ППК ядер играет огромную роль в построении классификаций дискретных форм материи более высоких уровней – атомов, молекул, веществ и их смесей. Но без доработки она вряд ли может быть использована в области радиоактивности, где большое значение имеет дефицит нейтронов. Отметим также, что связь аналогии объектов с величинами X и Y носит гипотетический характер. В качестве обоснования подхода можно привести историю открытия периодического закона (ПЗ) и построения ПСЭ. На основе гипотезы о связи свойств химических элементов с атомным весом Д.И. Менделеевым были получены выдающиеся результаты. ПЗ и ПСЭ сыграли огромную роль в развитии естествознания, в том числе в познании природы химических элементов. При этом доказана ошибочность исходной гипотезы. Таким образом, презумпция достоверности предполагаемой связи, до выяснения её истинной природы, на определенном этапе исследований вполне оправдана.

Таблица 1. Прогрессивно-последовательная классификация элементов.

Серии последовательностей A, B, C, D и субпрогрессии (j)													Поресени, (Y)																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
D (4)			C (3)			B (2)			A (1)																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
Количество элементов в субпрогрессии: $N_j = 4j - 2$																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
14			10			6			2																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
Суммарный дефицит заряда элементов субпрогрессии: $X_j = -(2j - 1)^3$																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
-343			-125			-27			-1																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
Последовательности, (X)																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
-31	-30	-29	-28	-27	-26	-25	-24	-23	-22	-21	-20	-19	-18	-17	-16	-15	-14	-13	-12	-11	-10	-9	-8	-7	-6	-5	-4	-3	-2	-1	0																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
$Z = X + Y$																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
2																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
4																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
12																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
20																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
38																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
56																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
88																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
120																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																											
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Yt	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	

Таблица 2. Характеристики частиц нулевой последовательности и их семейств.

	Антиэлементы					Элементарные частицы			Элементы							
	...	-Ca	-Mg	-Be	-He	-n	γ	p	He	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	Ra	<i>l20</i>
Частица	...															
Ординальное число частицы, <i>n</i>	...	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Заряд частицы, <i>Z</i>	...	-20	-12	-4	-2	0	0	0	2	4	12	20	38	56	88	120
Тетракратность заряда, <i>Z/4</i>	...	-5	-3	-1	-0,5	0	0	0	0,5	1	3	5	9,5	14	22	30
Ординальное число (<i>t</i>) триплета частиц и тип триплета по тетракратности	...	Триплет нечетногом-ракратный			Синглет	Триплет четногом-ракратный			Синглет	Триплет нечетногом-ракратный			Синглет	Триплет четногом-ракратный		
Ординальное число триплета, <i>t</i>	...	-1				0				1			2			
Ординальное число синглета, <i>s</i>	...				-1				-1				2			

От ППКЭ к общей прогрессивно-последовательной классификации объектов (ОППКО) нижних уровней дискретной организации материи

Рассмотренная ППК охватывает ряд элементарных частиц, ядра, химические элементы и антиэлементы. Закон изменения заряда частиц нулевой последовательности доказывает глубокое единство классификаций элементов и антиэлементов, буфером между которыми являются нейтрон, фотон и антинейтрон. Фотоны отождествляют свойства частицы и античастицы. Они являются переносчиками электромагнитного взаимодействия (электромагнитные взаимодействия осуществляются обменом фотонами) и участвуют в химических реакциях.

Используя аддитивность величин X , Y , Z , можно включить в классификацию объекты более высоких уровней организации – молекулы, вещество и разнообразные смеси (минеральные агрегаты, руды, горные породы и т. п.). В основе их единой классификации на верхних уровнях должны лежать общие признаки. Её нижние уровни должны отражать специфику объектов. Общая схема единой классификации: *состав объекта (качественная сторона состава) → количественные отношения частей состава) → строение объекта → свойства объекта*. Качественная сторона состава (квалитет) объекта является важнейшим системообразующим фактором при построении ОППКО.

Квалитет [англ. Quality качество, нем. Qualität качество] – видовой ядерный состав объекта без учета количественных соотношений видов ядер. Так, квалитет химического соединения CaCO_3 составляют ядра C , O и Ca . Основными характеристиками квалитета являются: *мультиплетность* (M) – количество элементов квалитета (в примере $M = 3$); *гетерогенность* (H) – число элементов квалитета с различными значениями Y (в примере $Y_{\text{C}} = 12$, $Y_{\text{O}} = 12$, $Y_{\text{Ca}} = 20$ (табл. 1), следовательно, $H_{\text{COCa}} = 2$); величины Z , X , Y квалитета как суммы аналогичных величин элементов квалитета (в примере $Z_{\text{COCa}} = Z_{\text{C}} + Z_{\text{O}} + Z_{\text{Ca}} = 6 + 8 + 20 = 34$; $X_{\text{COCa}} = X_{\text{C}} + X_{\text{O}} + X_{\text{Ca}} = -6 + (-4) + 0 = -10$; $Y_{\text{COCa}} = Y_{\text{C}} + Y_{\text{O}} + Y_{\text{Ca}} = 12 + 12 + 20 = 44$). В соответствии с (1) $Z_{\text{COCa}} = X_{\text{COCa}} + Y_{\text{COCa}} = -10 + 44 = 34$.

На основании значений X и Y объект относится к последовательности (X) и прогрессии (Y) одного или нескольких отношений (см. далее). Количество отношений определяется гетерогенностью (H). В примере $X_{\text{COCa}} = -10$, $Y_{\text{COCa}} = 44$, $H_{\text{COCa}} = 2$. Следовательно, химическое соединение CaCO_3 на основании характеристик квалитета относится к 44 прогрессии, -10 последовательности двух отношений.

Инверсия квалитета – его важнейшая составляющая. В ППК CaCO_3 рассматривается как соединение, находящееся в определенных связях с другими соединениями Ca и его аналогов, и как соединение C в определенных связях с другими соединениями углерода и его аналогов, а также как соединение O . Для расчета индексов отношений различных уровней, в которых

участвует соединение, используются формулы инверсий. Они получаются путем перестановок символов элементов в формуле квалитета. Следовательно, формула квалитета является одной из инверсий. Свойства квалитета не связаны с порядком символов элементов в формуле. Он характеризуется шестью инверсиями – CaCO , CaOC , CCaO , COCa , OCaC и OCCa . Зная Y элементов ($Y_{\text{Ca}} = 20$, $Y_{\text{C}} = 12$, $Y_{\text{O}} = 12$), можно вычислить индексы отношений R по формуле (15). Это будут в соответствии с гетерогенностью $H = 2$ два отношения – R_{24} и R_{32} .

Отношение наглядно можно представить в форме таблицы, «номером» которой является индекс отношения (R), связанный с критическим зарядом Y (15). Строки таблицы являются прогрессиями со своими индексами Y , столбцы – последовательностями с индексами X (табл. 1). Отношения связаны между собой так, что их индексы образуют прогрессии и последовательности. Чем сложнее состав соединения (выше мультиплетность M квалитета), тем больше уровней последовательностей отношений различных порядков ((15-17) и табл. 4). Отношение *многослойно*. Объекты различных структурных уровней (молекула вещества, его агрегатные состояния и т.д.) относятся к разным слоям одного отношения, так как имеют идентичные квалитеты. Расслоение отношения по составу квалитетов приведено в табл. 3. Все слои одного отношения имеют одинаковые наборы индексов прогрессий и последовательностей объектов. Поэтому отношение можно рассматривать как проекцию его слоев на горизонтальную плоскость или как пачку таблиц, для которой характерна своя структура. Так, в слое химических соединений можно выделить прослой таблиц твердых, жидких и газообразных веществ. Прослой твердых веществ может содержать прослой более низкого порядка – кристаллических и некристаллических веществ и т. д.

Общие формулы для вычисления индексов отношений R и их последовательностей различных порядков (S , S^{II} , S^{III} , ...) на основе формулы инверсии

$$R = Y_0 + Y_1 + \dots + Y_{M-1} \quad 14$$

$$S = Y_0 + Y_1 + \dots + Y_{M-2} \quad 15$$

$$S^{\text{I}} = Y_0 + Y_1 + \dots + Y_{M-3} \quad 16$$

.....

где M – мультиплетность квалитета объекта, $Y_0 = 0$. Так, для синглетов ($M = 1$), например, химических элементов и простых веществ, $R = Y_0 = 0$ (14), т. е. они относятся к нулевому отношению (R_0). В случае дублетов ($M = 2$), например, бинарных химических соединений, последовательность отношений равна нулю: $S = Y_0 = 0$ (15).

Определить набор прогрессий любого отношения R и последовательностей отношений различного уровня можно с помощью *математической модели прогрессивно-последовательных отношений*, фрагмент которой дан в табл. 4. Под индексом в верхней строке полужирным шрифтом располага-

Таблица 3. Фрагменты двух слоев отношения R38.

Порядок, γ	Последовательности, X								
	...	-21	-20	-19	-18	-17	-16	-15	...
	Отношение R38, слой Z26 (Fe)								
76	...	55FeCu	56FeZn	57FeGa	58FeGe	59FeAs	60FeSe	61FeBr	...
94	...	73FeAg	74FeCd	75FeIn	76FeSn	77FeSb	78FeTe	79FeI	...
126	...	105FeAu	106FeHg	107FeTl	108FePb	109FeBi	110FePo	111FeAt	...
158	...	137FeRg	138Fe(112)	139Fe(113)	140Fe(114)	141Fe(115)	142Fe(116)	143Fe(117)	...
	Отношение R38, слой Z34 (Se)								
76	...	55SeSc	56SeTi	57SeV	58SeCr	59SeMn	60SeFe	61SeCo	...
94	...	73SeY	74SeZr	75SeNb	76SeMo	77SeTc	78SeRu	79SeRh	...
126	...	105SeLu	106SeHf	107SeTa	108SeW	109SeRe	110SeOs	111SeIr	...
158	...	137SeLr	138SeRf	139SeDb	140SeSg	141SeBh	142SeHs	143SeMt	...

ется столбец индексов таксонов более низкого порядка. Так, нулевое отношение R_0 (нулевой столбец табл. 4) содержит прогрессии $Y_2, Y_4, Y_{12}, Y_{20}, Y_{38}, Y_{56}, Y_{88}, Y_{120}$. Нулевая последовательность отношений S_0 (тот же столбец) содержит отношения $R_2, R_4, R_{12}, R_{20}, R_{38}, R_{56}, R_{88}, R_{120}$.

Модель позволяет априорно строить систему прогрессивно-последовательных отношений объектов на рассматриваемом верхнем уровне классификации, оставляя места для неизвестных природных и техногенных объектов.

Таблица 4. Фрагмент модели прогрессивно-последовательных отношений.

	Индексы отношений и их последовательностей различного порядка: $R, S, S^{II}, S^{III}, S^{IV} \dots$																
	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	...
Последовательности индексов $Y, R, S, S^{II}, S^{III}, S^{IV} \dots$	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	32	...
	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	32	34	...
	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30	32	34	36	38	40	42	...
	20	22	24	26	28	30	32	34	36	38	40	42	44	46	48	50	...
	38	40	42	44	46	48	50	52	54	56	58	60	62	64	66	68	...
	56	58	60	62	64	66	68	70	72	74	76	78	80	82	84	86	...
	88	90	92	94	96	98	100	102	104	106	108	110	112	114	116	118	...
	120	122	124	126	128	130	132	134	136	138	140	142	144	146	148	150	...

Выше рассматривалась классификация на основании качеств объектов до уровня химических соединений включительно. Прогрессивно-последовательная классификация смесей на примере метасоматитов доложена автором на Годичном собрании РМО «Минералогические исследования и минерально-сырьевые ресурсы России» (Москва, 2007 г.).

Заключение

В итоге сформулирован закон прогрессивно-последовательных отношений объектов нижних уровней дискретной организации материи: *ядра, химические элементы, молекулы, вещества и смеси находятся в прогрессивно-последовательных отношениях, определяемых критическим зарядом Y и дефицитом заряда X ядер, связанных с зарядом Z [1].*

В учении о прогрессивно-последовательных отношениях дискретных образований материи сущность сходства, подобия или аналогии объектов кроется в идентичности дефицита заряда (дефицита протонов) их качества (видового ядерного состава).

Результаты математического исследования отношений объектов нижних уровней дискретной организации материи могут быть использованы при создании общей прогрессивно-последовательной классификации этих образований.

Список литературы

1. Бобков А.И. Общая классификация химических соединений в связи с анализом и прогнозированием новых типов руд. Современные методы

минералого-геохимических исследований как основа выявления новых типов руд и технологии их комплексного освоения // Матер. Годичного собрания РМО. СПб, 2006. С. 10-11.

2. Бобков А.И. Основы единой классификации объектов различных структурных уровней // Матер. VIII межд. конф. «Новые идеи в науках о Земле». Т. 5. М.: РГГРУ, 2007. С. 26-29.

3. Бобков А.И. Нулевая последовательность частиц в свете новых данных и в связи с исследованием минералов, горных пород и руд // Матер. XI съезда РМО. СПб, 2010. С. 28-30.

4. Бокий Г.Б. Перспектива создания естественной классификации химических соединений, в том числе минералов // Тр. Ин-та геол. и геофиз. СО АН СССР. 1985. № 610. С. 3-12.

5. Махов Б.Ф. «Мировой эфир» Д.И. Менделеева и его место в периодической системе // Фундаментальные исследования. 2008. № 2. С. 16-19.

6. Петров Т.Г., Краснова Н.И. R-словарь-каталог химических составов минералов. СПб.: Наука, 2010. 150 с.

7. Семишин В.И. Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева. М.: Химия, 1972. 188 с.

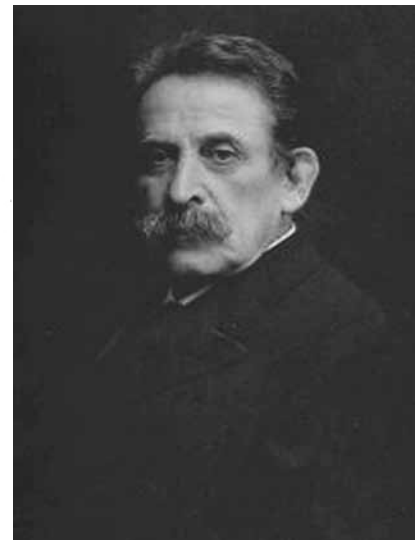
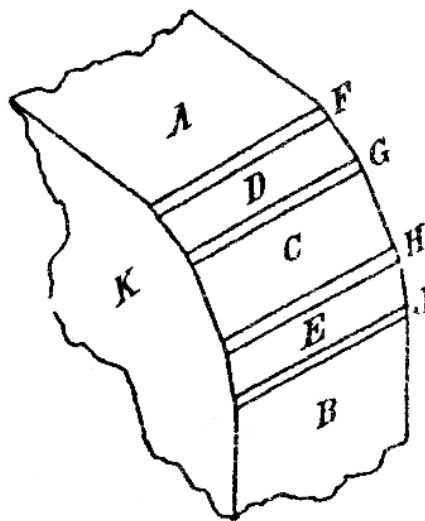
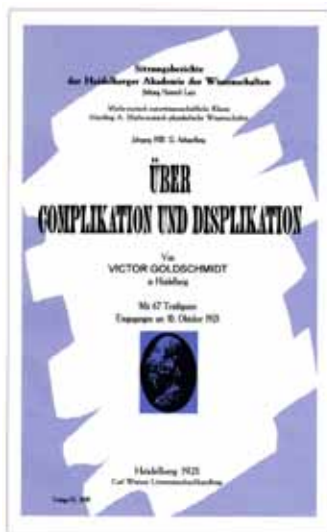
8. Учение о периодичности. История и современность / Ред. Д.Н. Трифонов. М.: Наука, 1981. 256 с.

КОМБИНАЦИЯ ПРОСТЫХ ФОРМ КАК АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ ПОЛУСТРУКТУРА

Войтеховский Ю.Л.

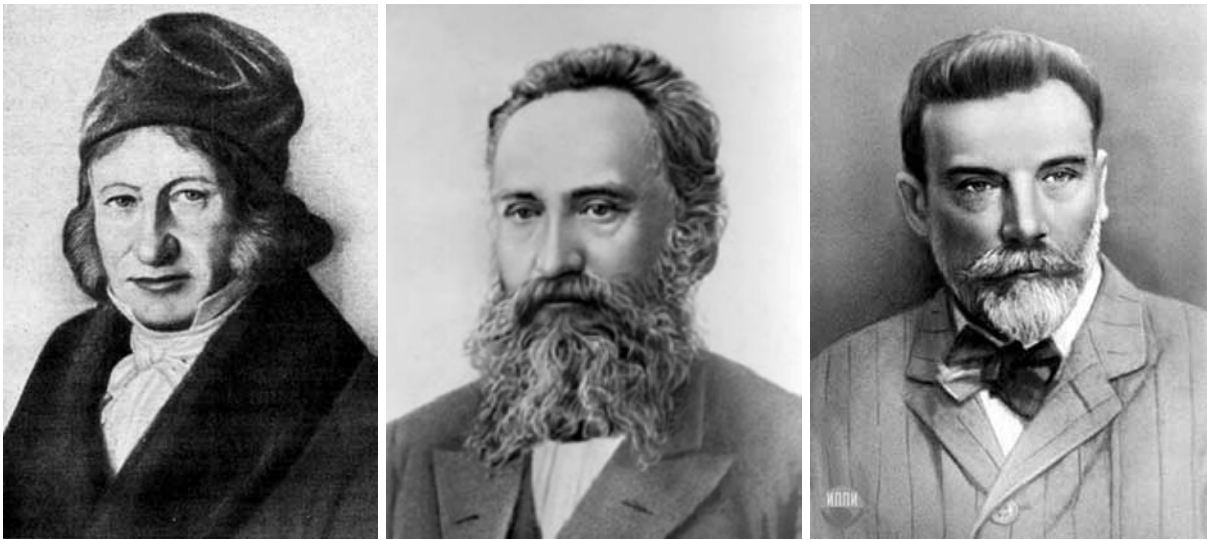
Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты; woyt@geoksc.apatity.ru

В каждом из 32 классов симметрии разрешён определённый набор простых форм. Различные простые формы одного класса связаны парагенетически, то есть получены размножением плоскостей частного и общего положения элементами соответствующей группы симметрии. В принципе, в данном классе теория допускает любое их сочетание. Что ещё мы знаем о комбинациях простых форм? Геометрическая кристалломорфология предоставляет нам правила зон (поясов) Х.С. Вейса (каждая грань кристалла принадлежит как минимум двум зонам; зона – совокупность граней, пересекающихся по параллельным рёбрам) и компликации В. Гольдшмидта (границ одного пояса образуются в результате последовательного притупления рёбер в соответствии с законом компликации (ряды Брокочи), одинаковым для всех зон всех кристаллических видов). Физическая кристалломорфология добавляет правила Е.С. Фёдорова (преимущественно развиты грани с наибольшей ретикулярной плотностью) и Г.В. Вульфа (преимущественно развиты грани с наименьшей скоростью роста).



В. Гольдшмидт (1853-1933), его книга «Über Komplikation und Displikation» (О компликации и диспликации. Пер. с нем., предисловие и примечания Ю.Л. Войтеховского под ред. Н.П. Юшкина. Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 1998. 69 с.) и схема последовательного притупления рёбер.

И всё же, отвлекаясь от физики и возвращаясь к исходным геометрическим определениям, зададим вопрос: содержит ли идея комбинации простых форм другие смыслы? Какая алгебраическая система при этом реализуется? Этот аспект теории до сих пор не обсуждался. Представляется, что этот раздел теории не исчерпан. Пусть $A_i, A_j, A_k \dots$ – простые формы одного класса симметрии; $i, j, k \dots = 1, \dots, n$; где n – число простых форм в классе. Обозначим их комбинацию $A_i * A_j * A_k * \dots$. Операцию $*$ по традиции будем называть



Х.С. Вейс (1780-1856), Е.С. Фёдоров (1853-1919) и Г.В. Вульф (1863-1925).

умножением. Определим полную совокупность комбинаций простых форм в классе: $\Sigma = \{A_i * A_j * A_k * \dots : \forall i, j, k \dots = 1, \dots, n\}$. Каковы её свойства?

Будем считать комбинацию $A_i * A_j * A_k * \dots$ однозначно определённой набором входящих в неё простых форм без морфологических или генетических смыслов: относительных площадей граней различных простых форм, последовательности их образования на кристалле и т.д. Тем самым определено, что Σ – группоид. При этом имеет место ассоциативность операции $*$: $(A_i * A_j) * A_k = A_i * (A_j * A_k)$, т.е. Σ – полугруппа.

Очевидно, $A_i * A_j = A_j * A_i$ для любых i, j , т.е. Σ – коммутативная полугруппа. Из $A_i * A_j = A_i * A_k$ следует $A_j = A_k$. Аналогично, из $A_i * A_k = A_j * A_k$ следует $A_i = A_j$ – имеют место левое и правое сокращения, т.е. Σ – полугруппа с двусторонним сокращением.

Для любой простой формы выполнено: $A_i * A_i = A_i$ – такие элементы в алгебраических системах называются идемпотентами. Каждый элемент полугруппы Σ идемпотентен. По сути это означает, что каждая простая форма присутствует на кристалле в одном экземпляре.

Особую роль в Σ играет полная комбинация простых форм данного класса $\Pi = A_1 * A_2 * \dots * A_n$. Для любой простой формы A_k выполнено: $A_k * \Pi = \Pi * A_k = \Pi$, т.е. Π – двусторонний 0 полугруппы Σ , а каждый её элемент – двусторонняя 1 для Π .

Любое подмножество простых форм из полной совокупности $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ порождает полугруппу Σ° , являющуюся подполугруппой для Σ . В полугруппе Σ° есть свой двусторонний 0 для Π° – полная комбинация образующих её простых форм. Каждый элемент из Σ° – двусторонняя 1 для Π° . Но в полугруппе Σ нет 1 (такой простой формы, комбинация которой с любой другой ничего к последней не добавляла бы), которую можно доопределить внешним образом для полноты системы.

Итак, полная совокупность комбинаций простых форм данного класса симметрии образует коммутативную полугруппу, каждый элемент которой идемпотентен, с двусторонним сокращением и 0, а также внешне присоединённой 1. Эти свойства лежат на поверхности, но приводят к содержательно-му результату ввиду следующей теоремы: всякая коммутативная полугруппа



па идемпотентов изоморфна некоторой полугруппе, элементами которой являются подмножества некоторого множества, а действием – операция пересечения [1]. Искомую полугруппу, изоморфную полугруппе Σ , образуют её подмножества R_x всех элементов, делящихся на X , т.е. всех комбинаций простых форм, содержащих форму X .

Полугруппы этого вида играют в алгебре особую роль ввиду их связи с понятием частичной упорядоченности и теоремы: для каждой коммутативной полугруппы идемпотентов существует единственная сопряжённая с ней полуструктура. Нужен более глубокий анализ выявленной фундаментальной полугруппы и сопряжённой полуструктуры применительно к объектам минералогической кристаллографии.

Выявленная коммутативная полугруппа идемпотентов дана нам в виде комбинаций простых форм на природных кристаллах, что говорит о её «естественном» характере. Пока не ясно, что несут в себе выявленные полугруппы и полуструктуры для описания реальных кристаллов.

Ранее показано [2], что многообразия закрытых простых форм в каждом классе симметрии автодуальны и распадаются на два типа. Для замыкания многообразий 2-го типа требуются определённые комбинации простых форм, тем самым выделенные из всех теоретически разрешённых комбинаций. Пока не ясно, можно ли использовать процедуру дуального перехода (куб vs октаэдр, тетрагонтриоктаэдр vs куб + октаэдр + ромбододекаэдр, ромбододекаэдр vs архимедов кубоктаэдр, тетрагексаэдр vs октаэдр, усечённый гранями куба, тригонтриоктаэдр vs куб, усечённый гранями октаэдра, бипирамида vs комбинация одноимённой призмы и пинакоида, и т.д.) для построения ещё более содержательной алгебраической системы, чем полугруппа Σ . Возможно, наличие дуальных простых форм и их комбинаций на природных кристаллах указывает на такую возможность.

Флюорит (слева, Намибия) и топаз (справа, Урал) – прекрасные примеры встречаемости дуальных простых форм и их комбинаций на одном кристалле: куб vs октаэдр; бипирамида vs комбинация призмы и пинакоида [http://geo.web.ru/druza/L-Dalnegor_M.htm, http://geo.web.ru/druza/m-flu_33-pg138.htm].

Список литературы

1. Ляпин Е. С. Полугруппы. М.: Физматгиз, 1960. С. 83-85.
2. Войтеховский Ю. Л. 12 этюдов на темы кристалломорфологии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во К & М, 2011. С. 60-73.

ЖЁСТКОСТЬ И ИЗГИБАЕМОСТЬ МНОГОГРАННИКОВ И ШАРНИРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

Ковалёв М.Д.

МГУ им. М.В. Ломоносова, mdkovalev@mtu-net.ru

Дан обзор результатов по жёсткости многогранников, включающий классическую теорему Коши, пример невыпуклого изгибаемого многогранника и решение И.Х. Сабитовым гипотезы «кузнечных мехов». Анализируются понятия неизгибаемости, жёсткости и статической жёсткости многогранников, шарнирных и напряжённосвязанных конструкций, исследованы их связи. Вопросы приводят к малоизученным свойствам квадратичных отображений многомерных евклидовых пространств.

От Евклида до Коши

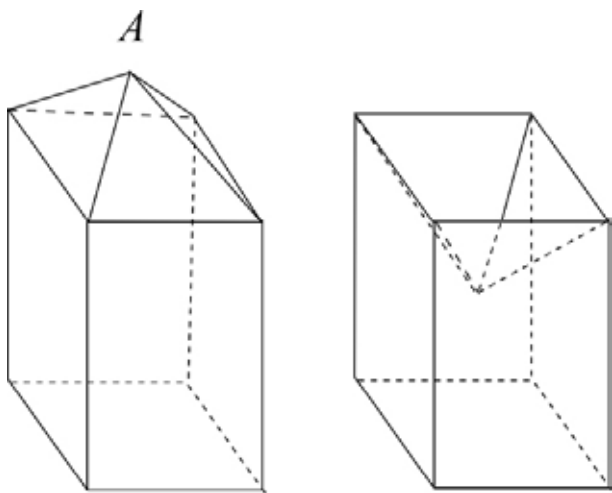


Рис. 1.

В XI книге «Начал» Евклида (300 г. до н. э.) многогранники определяются как равные, если они составлены из соответственно равных граней, взятых в одинаковом порядке. Но это не всегда верно (рис. 1). Правый многогранник отличается от левого тем, что его верхний 4-гранный угол с вершиной A отражён относительно плоскости, проходящей через концы рёбер угла. Л. Эйлер (1776) высказал гипотезу: «Замкнутая пространственная фигура не допускает изменений, пока

не рвётся». Вероятно, под изменениями он имел в виду непрерывные деформации замкнутой поверхности. Первый точный результат в этом направлении получил в 1813 г. О.Л. Коши (1789-1857). Эта чуть ли не единственная геометрическая работа прославленного и очень плодовитого аналитика является настоящей жемчужиной геометрии.

Теорема (О.Л. Коши). *Два выпуклых ограниченных многогранника с соответственно равными и одинаково расположенными гранями равны между собой.*

Условие выпуклости многогранника (рис. 1) существенно. Удобно называть многогранником многогранную поверхность, представляющую собой границу телесного многогранника. *Выпуклым* называется многогранник, лежащий целиком по одну сторону от плоскости каждой своей грани.

Изгибаемым называют многогранник, допускающий непрерывную деформацию, изменяющую двугранные углы, но не изменяющую граней. Для таких деформаций можно представлять грани многогранника соединёнными между собой рояльными петлями. *Неизгибаемостью* многогранника называется невозможность его непрерывных деформаций с сохранением граней. Очевидным следствием теоремы Коши является неизгибаемость выпуклых многогранников с сохранением выпуклости.

Доказательство теоремы Коши использует формулу Эйлера, связывающую числа v вершин, p рёбер и z граней: $v - p + z = 2$ произвольного выпуклого многогранника. Ключевую роль в доказательстве Коши играет следующая лемма.

Лемма 1. *Если двугранные углы при вершине выпуклого многогранника при его деформации, не меняющей граней, изменяются, то по крайней мере 2 из них увеличиваются и 2 уменьшаются, и при обходе этой вершины имеется не менее 4 чередований уменьшающихся и увеличивающихся углов.*

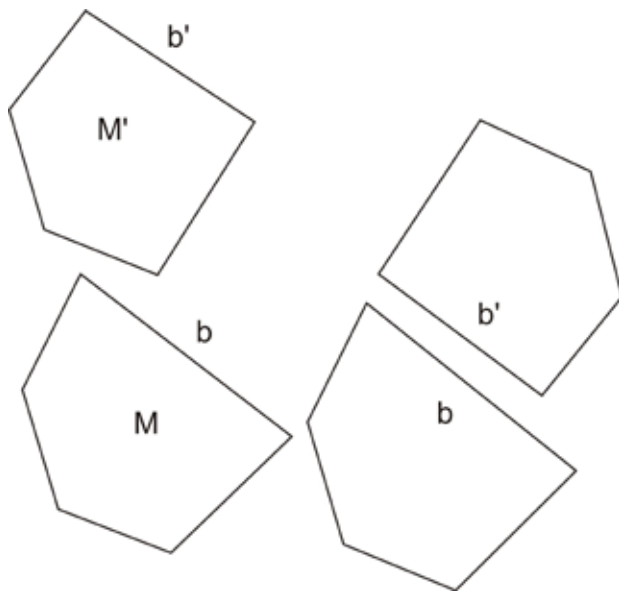


Рис. 2.

Используя её путём арифметических подсчётов на сетке рёбер, изменившихся при деформации двугранных углов, Коши с использованием формулы Эйлера получил противоречие, доказывающее теорему.

При доказательстве леммы 1 Коши опирался на следующее, кажущееся очевидным, утверждение. Пусть M и M' - два выпуклых многоугольника с одинаковым числом сторон, причём все стороны многоугольника M' равны соответствующим сторонам M , кроме b' и b (рис. 2 а).

Лемма 2. *Пусть все углы многоугольника M , не прилегающие к стороне b , не меньше соответствующих углов многоугольника M' , и хотя бы один из этих углов строго больше, тогда сторона b длиннее стороны b' .*

Коши применил вариант леммы 2 к сферическим многоугольникам, получаемым сечением многогранного угла многогранника сферой с центром в вершине этого многогранного угла. Длины сторон такого сферического многоугольника, очевидно, не меняются при изменении двугранных углов многогранника. В плоском случае из леммы 2 сразу вытекает, что при деформации многоугольника, сохраняющей длины сторон, при обходе многоугольника имеется не менее 4 чередований уменьшающихся и увеличивающихся углов. Предположение всего двух чередований приводит к тому, что

диагональ, разделяющая уменьшившиеся и увеличившиеся углы, с одной стороны, должна увеличиться вследствие леммы 2, с другой – уменьшиться (рис. 2 б).

Любопытно, что в доказательстве Коши леммы 2 спустя столетие была обнаружена и исправлена погрешность. Коши в своём индуктивном по числу сторон доказательстве пропустил возможность возникновения промежуточных невыпуклых многоугольников, для которых лемма 2 может оказаться неверной.

Изгибаемость и жёсткость

Результат, распространяющий теорему Коши на криволинейные выпуклые трижды дифференцируемые поверхности, получен С. Кон-Фоссеном. Окончательный результат для произвольных выпуклых поверхностей в 1951 г. получил А.В. Погорелов.

Теорема (А.В. Погорелов). *Замкнутая выпуклая поверхность неизгибаема с сохранением выпуклости.*

Требование сохранения выпуклости необходимо. На рис. 1 можно непрерывно «вдавливает» внутрь многогранника окрестность его вершины A , отражая верхушку четырёхгранного угла от плоскости, близкой к A и параллельной плоскости, проходящей через концы рёбер этого угла. Важным понятием, связанным с неизгибаемостью, является жёсткость. Многогранник (шарнирная конструкция) называется *жёстким*, если любой набор скоростей его вершин, оставляющий в первом приближении грани конгруэнтными себе (длины рёбер стационарными), порождается полем скоростей движения пространства как жёсткого целого. *Нежёстким* – в противном случае. На рис. 3 показаны скорости концов отрезка ab , оставляющие его длину стационарной. Для этого необходимо и достаточно равенства их проекций на направление отрезка. Жёсткость влечёт неизгибаемость, но не наоборот. На рис. 4б показана неизгибаемая, но не жёсткая шарнирная конструкция. Её свободный шарнир (кружок) лежит на отрезке, соединяющем два закреплённых в плоскости шарнира (крестики). Скорость свободного шарнира, перпен-

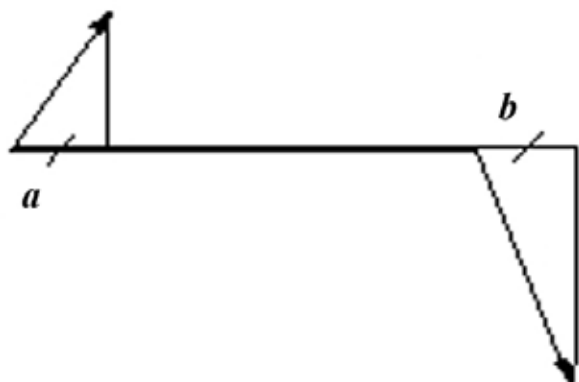


Рис. 3.

дикулярная отрезку, оставляет длины двух рычагов-стержней конструкции стационарными. Закреплённые в плоскости шарниры имеют нулевые скорости. Этот набор скоростей не порождается никаким полем скоростей плоскости, ибо последнее есть либо постоянное поле, либо поле скоростей при вращении плоскости вокруг мгновенного центра вращения. Конструкция рис. 4а жестка. Жёст-

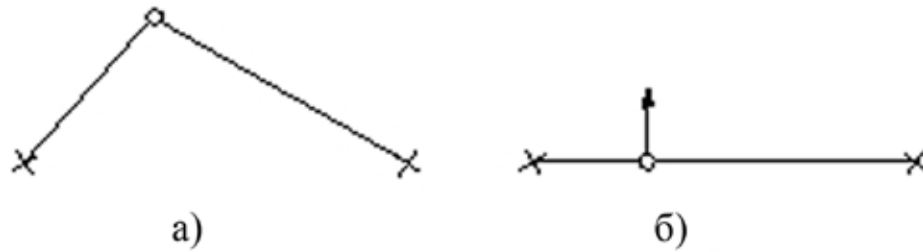


Рис. 4.

кость – линейная версия неизгибаемости. В англоязычной литературе термин «rigidity» обозначает неизгибаемость, «infinitesimal rigidity» – жёсткость. Жёсткость многогранника с треугольными гранями (симплициального) равносильна жёсткости шарнирно-рычажного каркаса из его рёбер.

Исследование жёсткости шарнирных конструкций основано на анализе рычажного отображения F , сопоставляющего радиус-векторам p_i свободных шарниров конструкции квадраты длин её рычагов $l_{ij}^2 = (p_i - p_j)^2$. Строка-матрица

dF дифференциала отображения имеет вид $2\|0 \dots 0 p_i - p_j 0 \dots 0 p_j - p_i 0 \dots 0\|$ с ненулевыми элементами, стоящими в столбцах, отвечающих координатам шарниров p_i и p_j , если оба они свободны. Линейная зависимость столбцов матрицы равносильна существованию ненулевого поля скоростей шарниров, сохраняющего длины рычагов стационарными. Число строк матрицы равно числу рычагов, число столбцов равно dm , где d – размерность пространства, m – число свободных шарниров конструкции. Необходимым и достаточным условием жёсткости шарнирной конструкции $p = (p_1, p_2, \dots, p_m)$ без закреплённых шарниров в плоскости является равенство $Rg dF(p) = 2m - 3$, в пространстве – $Rg dF(p) = 3m - 6$. Необходимое условие – число рычагов конструкции не менее правых частей этих равенств. Вычитаемые 3 и 6 – размерности полей скоростей плоскости и пространства, порождаемых их движениями как жёсткого целого.

Теорема (Ден, 1916). *Выпуклый симплициальный многогранник жёсток.*

Поскольку треугольные грани жестки, то этот вопрос сводится к исследованию незакреплённых шарнирных конструкций. Покажем, что в этом случае выполнено необходимое условие жёсткости $p \geq 3v - 6$ для рёберного остова многогранника. Для симплициального многогранника $2p = 3v$. Подставляя в формулу Эйлера, получим $v - p + 2p/3 = 2$. Отсюда имеем $p = 3v - 6$.

Теорема (А.Д. Александров, 1958). *Для произвольного выпуклого многогранника рёберный остов триангуляции, вершины которой не лежат внутри граней многогранника, жёсток.*

Теорема Дена является частным случаем теоремы Александрова. Условие последней необходимо, ибо если вершина триангуляции лежит внутри грани, то поле скоростей, состоящее из ненулевой и перпендикулярной грани скорости этой вершины и нулевых скоростей остальных вершин, не порождается движением пространства, оставляя стационарными длины всех рёбер.

Доказательство следующей теоремы опирается на теорему Александрова.

Теорема (Gluck, 1975). *Почти все гомеоморфные сфере многогранники с треугольными гранями жестки.*

«Почти все» здесь понимается как открытое всюду плотное множество в пространстве параметров, определяющих эти многогранники. Из этой теоремы вытекает неизгибаемость почти всех гомеоморфных сфере многогранников.

Изгибаемые многогранники

В свете перечисленных результатов кажется удивительным существование изгибаемых многогранников. Первые примеры изгибаемых многогранных поверхностей нашёл французский механик и математик Р. Брикар (1897). Это самопересекающиеся изгибаемые октаэдров двух типов. Опишем изгибаемый октаэдр 1-го типа. На рис. 5 изображён антипараллелограмм – самопересекающийся 4-угольник, который можно изгибать в плоскости с изменением угла α . При этом вокруг него можно описать окружность радиуса $R(\alpha)$ с центром $O(\alpha)$. Если взять вершину октаэдра над центром окружности (рис. 6)

на высоте $H(\alpha) = \sqrt{l^2 - R^2(\alpha)}$, то все рёбра октаэдра, соединяющие его вершину с вершинами антипараллелограмма, будут иметь длину l независимо от угла α . Эти рёбра вместе со сторонами антипараллелограмма ограничивают треугольные грани верхней половины октаэдра Брикара. Нижняя половина симметрична верхней относительно плоскости антипараллелограмма.

Первый несамопересекающийся, гомеоморфный сфере изгибаемый многогранник построил Р. Коннелли (1977). Он имеет 18 вершин и построен на основе октаэдров Брикара.

Сегодня самым простым изгибаемым несамопересекающимся многогранником является многогранник Штеффена с 9 вершинами. Существуют ли более простые изгибаемые многогранники – неизвестно. Развёртка многогранника Штеффена со схемой её склеивания изображена на рис. 7. После того как были найдены изгибаемые несамопересекающиеся многогранники естественно возник вопрос: может ли изменяться объём, ограниченный таким многогранником? Во всех примерах он был постоянен. Гипотеза постоян-

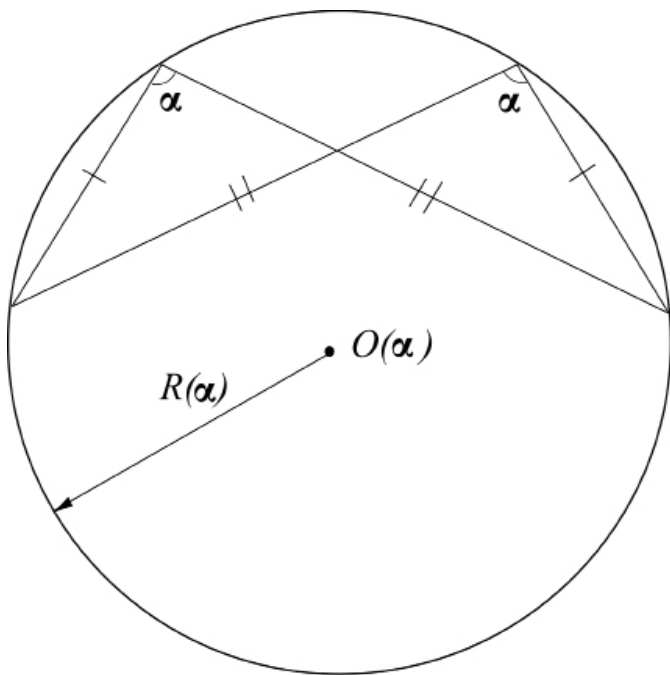


Рис. 5.

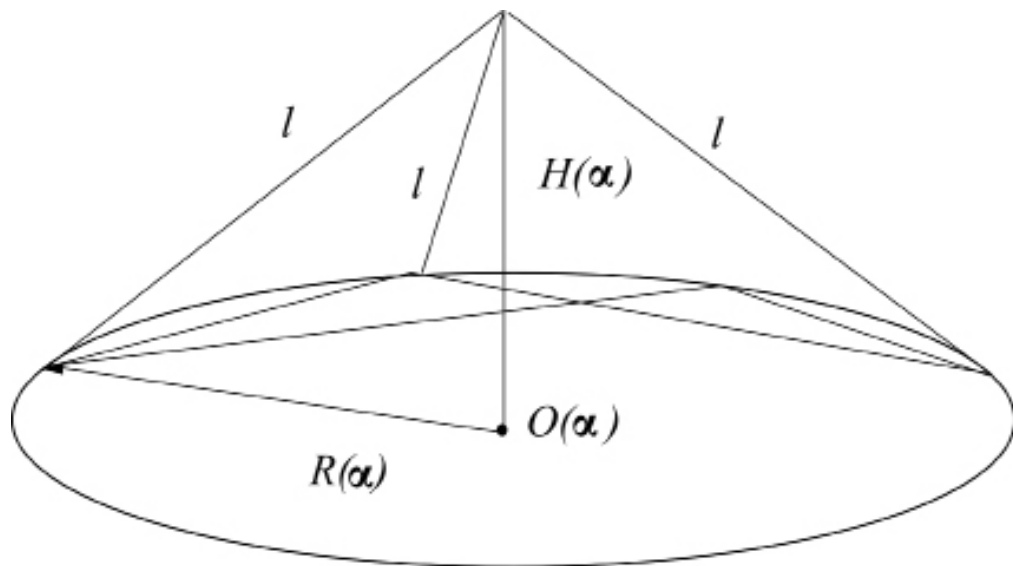


Рис. 6.

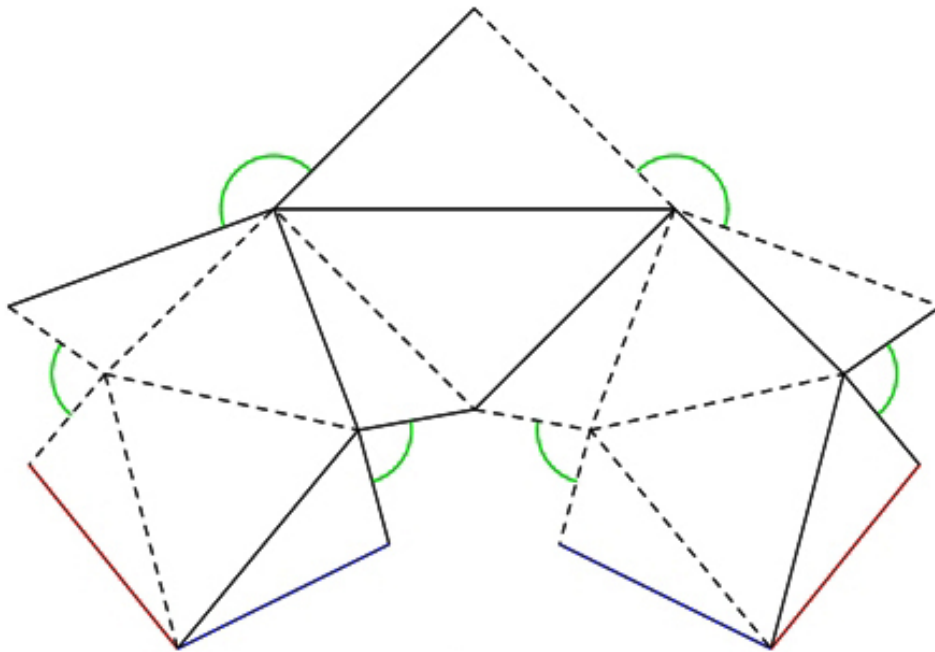


Рис. 7.

ства этого объёма высказана Р. Коннелли (1978) и получила название гипотезы «кузнечных мехов». Положительный ответ на этот вопрос даёт

Теорема (И.Х. Сабитов, 1996). *Объём многогранника с треугольными гранями является корнем многочлена, коэффициенты которого зависят лишь от длин рёбер многогранника.*

Поскольку многочлен имеет конечное число корней, а объём при изгибании многогранника меняется непрерывно, то он должен оставаться постоянным. Требование симплициальности граней необременительно, поскольку любую нетреугольную грань можно разбить на треугольные. Число рёбер многогранника при этом увеличится. Недавно А.А. Гайфуллин доказал многомерный аналог теоремы Сабитова:

Теорема (А.А. Гайфуллин, 2012). *Любой изгибаемый многогранник в евклидовом пространстве размерности 4 и выше при изгибании сохраняет свой объем.*

Жёсткость и статическая жёсткость

Жёсткость шарнирно-рычажных конструкций тесно связана с их статическими свойствами. В идеальной шарнирной конструкции силы действуют лишь вдоль рычагов. Силу, действующую на шарнир p_i со стороны рычага $p_i p_j$, удобно записывать в виде $\omega_{ij} (p_i - p_j)$. Здесь скаляр ω_{ij} называют (*внутренним*) *напряжением рычага* $p_i p_j$. Величины напряжений ω_{ij} дают меру напряженности рычагов: если $\omega_{ij} < 0$, то рычаг $p_i p_j$ растянут, если $\omega_{ij} > 0$, то он сжат. Из равенства действия противодействию вытекает равенство $\omega_{ij} = \omega_{ji}$. В инженерной литературе термин «напряжение рычага» имеет другой смысл. Напряжением называется сила e_{ij} на единицу площади поперечного сечения. Если s_{ij} площадь поперечного сечения рычага, то связь внутреннего напряжения с инженерным такова: $\omega_{ij} = \frac{e_{ij} s_{ij}}{|p_i - p_j|}$.

Если на i -й шарнир конструкции действует внешняя сила f_i , то условие равновесия сил, приложенных к шарниру, имеет вид

$$\sum_j \omega_{ij} (p_i - p_j) + f_i = 0, \quad 1$$

где суммирование проводится по всем шарнирам, смежным i -му. Если внешних сил нет и условия выполнены на всех свободных шарнирах при ненулевом наборе $\omega = \{\omega_{ij}\}$, этот набор называют *внутренним напряжением шарнирника*. Существование внутреннего напряжения в шарнирнике p равносильно зависимости строк матрицы $dF(p)$ с коэффициентами ω_{ij} .

Если мы имеем дело с незакреплённым шарнирником, необходимо рассматривать уравновешенные силовые нагрузки $f = \{f_i\}$ на него, то есть нагрузки, удовлетворяющие условиям $\sum f_i = 0$, $\sum f_i \times p_i = 0$. Шарнирник p называется *статически жёстким*, если для него система (1) разрешима при произвольной уравновешенной силовой нагрузке f . Это означает, что при произвольной уравновешенной внешней нагрузке в шарнирнике возникают внутренние напряжения, уравновешивающие её.

Теорема. *Статическая жёсткость шарнирника равносильна его жёсткости.*

Действительно, условием статической жёсткости шарнирника p является равенство ранга матрицы $dF(p)$ размерности линейной оболочки векторов f уравновешенных наборов сил, равной $2m - 3$ в плоском и $3m - 6$ в пространственном случае.

Важным свойством жёсткости является её инвариантность при проективных преобразованиях.

Теорема. При проективных преобразованиях, переводящих шарнирник p в шарнирник p' и не удаляющих шарниров в бесконечность (в частности, при аффинных преобразованиях), шарнирник p' жёсток тогда и только тогда, когда жёсток шарнирник p .

Напряжённосвязанные конструкции или стяжки

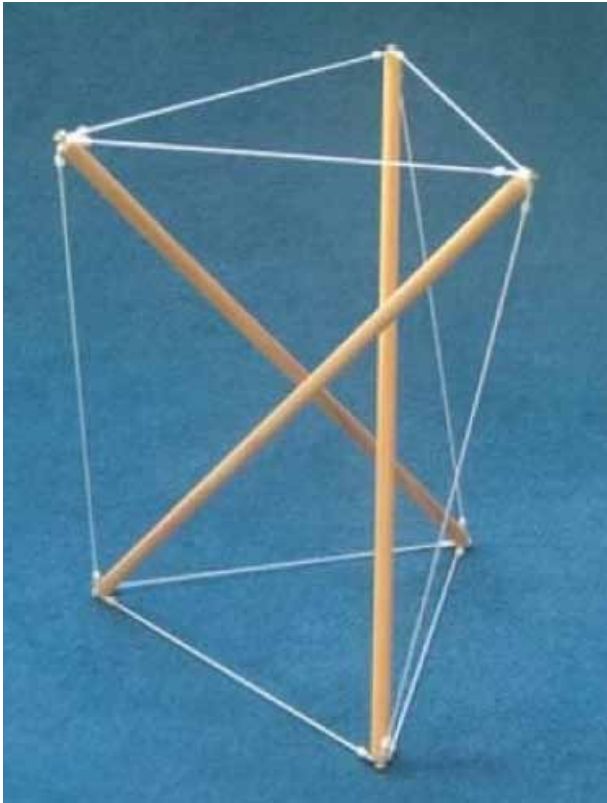


Рис. 8.

На рис. 8 дана простейшая напряжённосвязанная конструкция (стяжка). На основе таких конструкций составляют более сложные (рис. 9). Хотя конструкции такого рода известны уже около века, их внедрение в архитектуру и строительство связывают с именами двух американцев – К. Снельсона (K. Snelson), скульптора и фотографа, автора концепции «напряжённой целостности» (tensegrity), и Р.Б. Фуллера (R.B. Fuller), архитектора и инженера, автора термина «синергетика». В его честь названы фуллерены.

Стяжки отличаются от шарнирников тем, что кроме рычагов шарниры могут быть связаны между собой тросами и распорками,

причём связи стяжки не ограничиваются рычагами. Трос между шарнирами накладывает на эти два шарнира то условие, что расстояние между ними не больше длины троса, распорка – расстояние между шарнирами – не меньше длины распорки. Конструкции рис. 8 и 9 вообще не содержат рычагов, соединённых вращательными парами. Будем называть их *вязанками*. Шарниры в вязанках и стяжках естественно называть узлами.

Для допустимых скоростей шарниров (узлов) стяжки справедливы соотношения:

$$\begin{aligned}(p_i - p_j) \cdot (p'_i - p'_j) &= 0, \\ (p_i - p_j) \cdot (p'_i - p'_j) &\leq 0, \\ (p_i - p_j) \cdot (p'_i - p'_j) &\geq 0,\end{aligned}$$

Стяжка называется *жёсткой*, если любой допустимый набор скоростей её шарниров является тривиальным, т.е. порождается движением стяжки как жёсткого целого. Необходимое условие жёсткости пространственной незакреплённой стяжки: (число связей) $> 3(\text{число узлов}) - 6$, для плоской стяжки: (число связей) $> 2(\text{число узлов}) - 3$. На рис. 10 изображены две жёстких пло-



Рис. 9.

ских стяжки –вязанки. Двойные линии обозначают распорки, пунктиры – тросы. Число связей 6, узлов – 4. Интересно то, что конструкция на рис. 10а собирается единственным способом в евклидовом пространстве произвольной размерности > 1 . Половину конструкции рис. 10б можно вращать в пространстве вокруг диагонали, соблюдая условия связей. Повернув эту половину на 180° , получим изгибаемую в плоскости конструкцию.

Неравенства в условиях жёсткости стяжек имеют простую геометрическую природу. Так, в случае пространственной вязанки условия связей задают части $3n$ -мерного пространства параметров, положений узлов

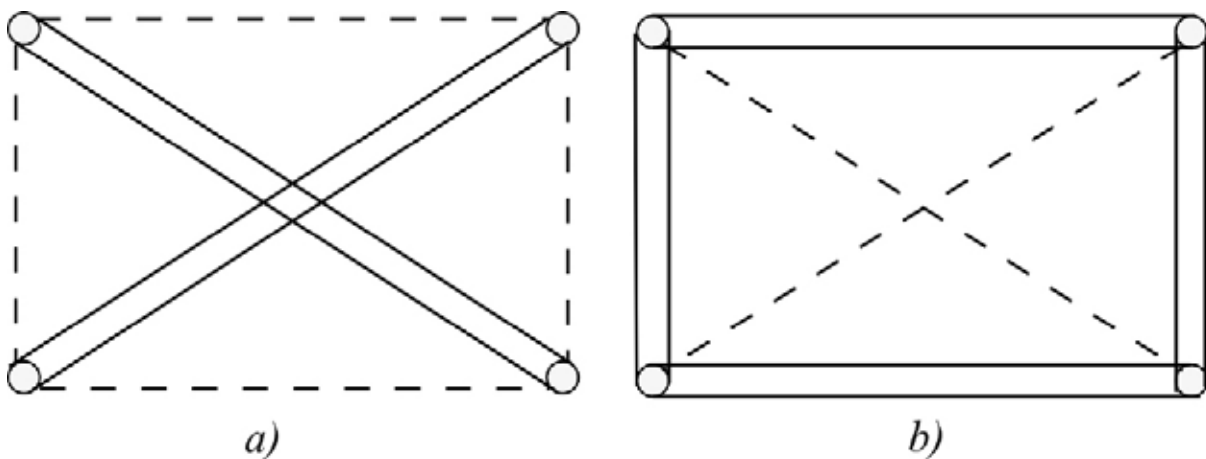


Рис. 10.

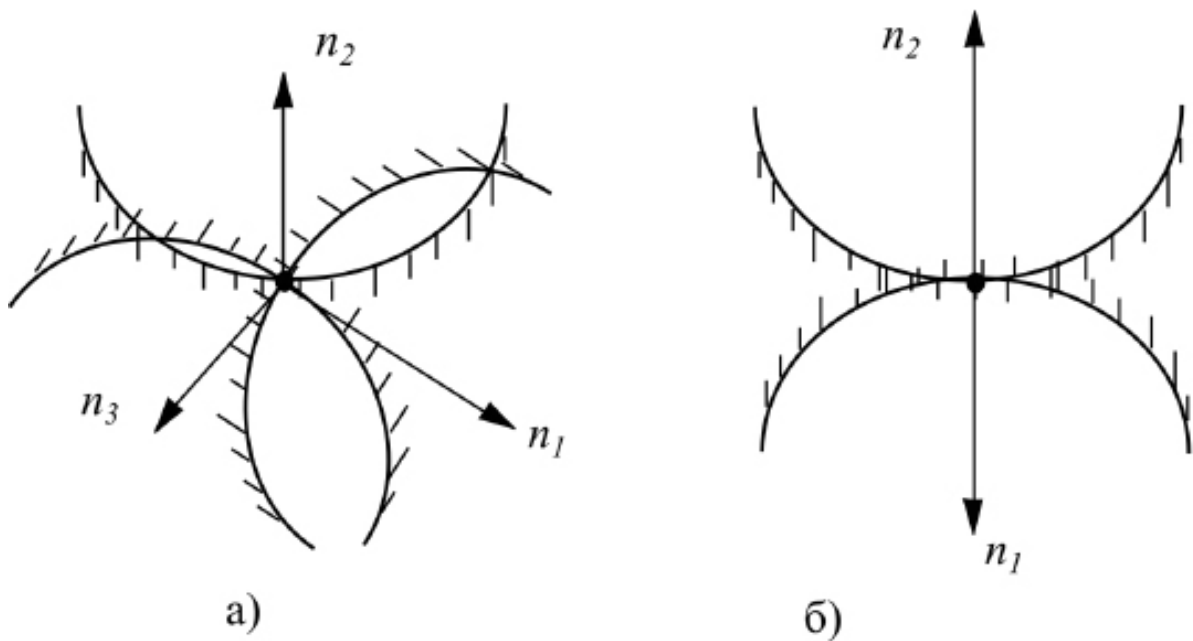


Рис. 11.

$(p_1, p_2, \dots, p_m) = p$ вязанки, ограниченные цилиндрическими поверхностями. Для распорки это внешняя часть цилиндра $(p_i - p_j)^2 \geq l_{ij}^2$, где l_{ij}^2 – длина распорки. Закрепим часть узлов вязанки в пространстве так, чтобы исключить её подвижность как жёсткого целого. Тогда жёсткость вязанки p равносильна возможности представить любой вектор пространства параметров в виде линейной комбинации с неотрицательными коэффициентами внешних нормалей к этим поверхностям в точке p пространства параметров (рис. 11а). Для этого необходимо, чтобы число этих поверхностей, а значит и связей, по крайней мере на 1 превосходило размерность пространства параметров. Так, для вязанки рис. 8 при закреплении трёх нижних узлов и отбрасывании соединяющих их тросов получаем число узлов 3 и число связей 9, что говорит о нежёсткости вязанки. Жёсткость шарнирно-рычажной конструкции p равносильна тому, что любой вектор пространства параметров можно представить в виде линейной комбинации с произвольными коэффициентами нормалей к аналогичным поверхностям, задающим условия постоянства длин рычагов. В этом случае необходимое число поверхностей равно размерности пространства параметров.

Стяжка называется *статически жёсткой*, если любая равновесная нагрузка на её узлы уравнивается напряжениями её связей, причём тросы могут быть лишь растянуты, а распорки – лишь сжаты. Справедлива следующая теорема.

Теорема. *Стяжка статически жёстка тогда и только тогда, когда она жёстка.*

Пространственные вязанки как правило не жестки. Так, для вязанки рис. 12 число узлов 20, связей 40, а для её жёсткости оно должно быть больше 54. Несмотря на нежёсткость пространственные вязанки хорошо

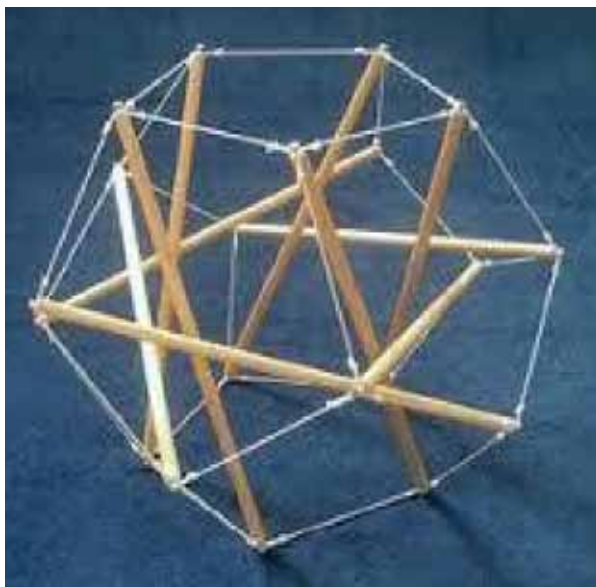


Рис. 12.

держат форму за счёт деформаций и внутренних напряжений. Геометрическая природа этого проиллюстрирована на рис. 11б, где единственная точка (чёрный кружок), не лежащая внутри заштрихованных внешних областей двух кругов, лежит в пересечении их граничных окружностей. В пространстве параметров ей отвечает неизгибаемая, но не жёсткая вязанка. Стяжки ещё мало исследованы математически. В этом направлении англоязычными авторами ведётся интенсивная работа. В качестве примера приведём следующую теорему.

Теорема (Р. Коннелли, 1982). *Плоская вязанка, все узлы которой лежат в вершинах выпуклого многоугольника, тросы – стороны этого многоугольника, распорки – какие-то из его диагоналей, допускающая внутреннее напряжение, ненулевое на каждой связи, определена однозначно с точностью до движений. Заключение теоремы верно и в пространстве размерности > 2 .*

В заключение сформулируем естественный, но пока не решённый вопрос про вязанки.

Можно ли из одних и тех же элементов, соединяя их в одинаковом порядке, собрать две неконгруэнтные и неизгибаемые вязанки?

О СТРОЕНИИ БИНАРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ВИДЕ ДВУХ БИРАДИАЛЬНЫХ УПАКОВОК, СОПРЯЖЕННЫХ ЧЕРЕЗ ДЛИНУ СВЯЗИ

Раменская М.Е.

МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва

Когда в 1947 г. Н.В. Белов опубликовал кристаллохимическую теорию плотнейших упаковок (ПУ), геометрической теории по этому вопросу не было, но было известно, что кубическая ПУ действительно является плотнейшей [Белов, 1947]. Ныне доказана «теорема тринадцатого шара» – о том, что любая упаковка, где вокруг шара находится 12 касающихся его шаров того же диаметра, является плотнейшей и тринадцатый шар поместить невозможно [Misin, Tarasov, 2010]. Между тем, для кристаллохимии интереснее то, что для кубической ПУ венгерским математиком М. Холлай разработана геометрическая теория бирадиальных плотнейших упаковок или ρ -систем. Ею рассмотрено, как ведёт себя ПУ, если в каждую октаэдрическую или тетраэдрическую пустоту из сфер радиуса 1 поместить сферы радиуса ρ . При этом ρ для всех сфер одновременно изменяется от 0 до 1, а общая упаковка остаётся плотнейшей. Она доказала, что как только ρ переходит за величину, разрешённую правилами Магнуса-Гольдшмидта, то упаковка искажается, её симметрия падает, с ростом ρ возникают новые координационные многогранники (к.м.) [Hollai, 1981]. Все они входят в число неклассических к.м., открытых Н.В. Беловым на кристаллических структурах «с крупными катионами». Эта работа в кристаллографических терминах была доложена М. Холлай в докладе на Фёдоровской сессии 1979 г., а опубликована почти 30 лет спустя [Холлай, 2006]. Плотность упаковки падает неравномерно, образуя в отдельных точках кривой заполнения пространства локальные максимумы, причём симметрия упаковки в этот момент изменяется (рис. 1). Так, при достижении ρ в октаэдрической пустоте величины $\rho = \sqrt{3} - 1 = 0.73205$ сфера ρ оказывается в кубической координации, возникает структурный тип CsCl. По достижении $\rho = 1$ образуется та же ПУ, что и при $\rho = 0$. Начало разработки геометрической теории ПУ позволяет по-новому поставить вопрос о том, почему атомы в кристаллических структурах часто располагаются по законам ПУ и что их образует?

Сопряженные упаковки в бинарных структурах

Теорией ρ -систем описываются классические и беловские «с крупными катионами» ПУ. Упаковки реальных бинарных кристаллов A_nB_m могут быть описаны как бирадиальные. Какие атомы играют в структуре роль больших, какие – малых сфер? Для любого атома в кристалле с бинарной структурой во второй координационной сфере можно вычислить радиус большей сферы R_A или R_B – это половина минимального расстояния между одноимёнными

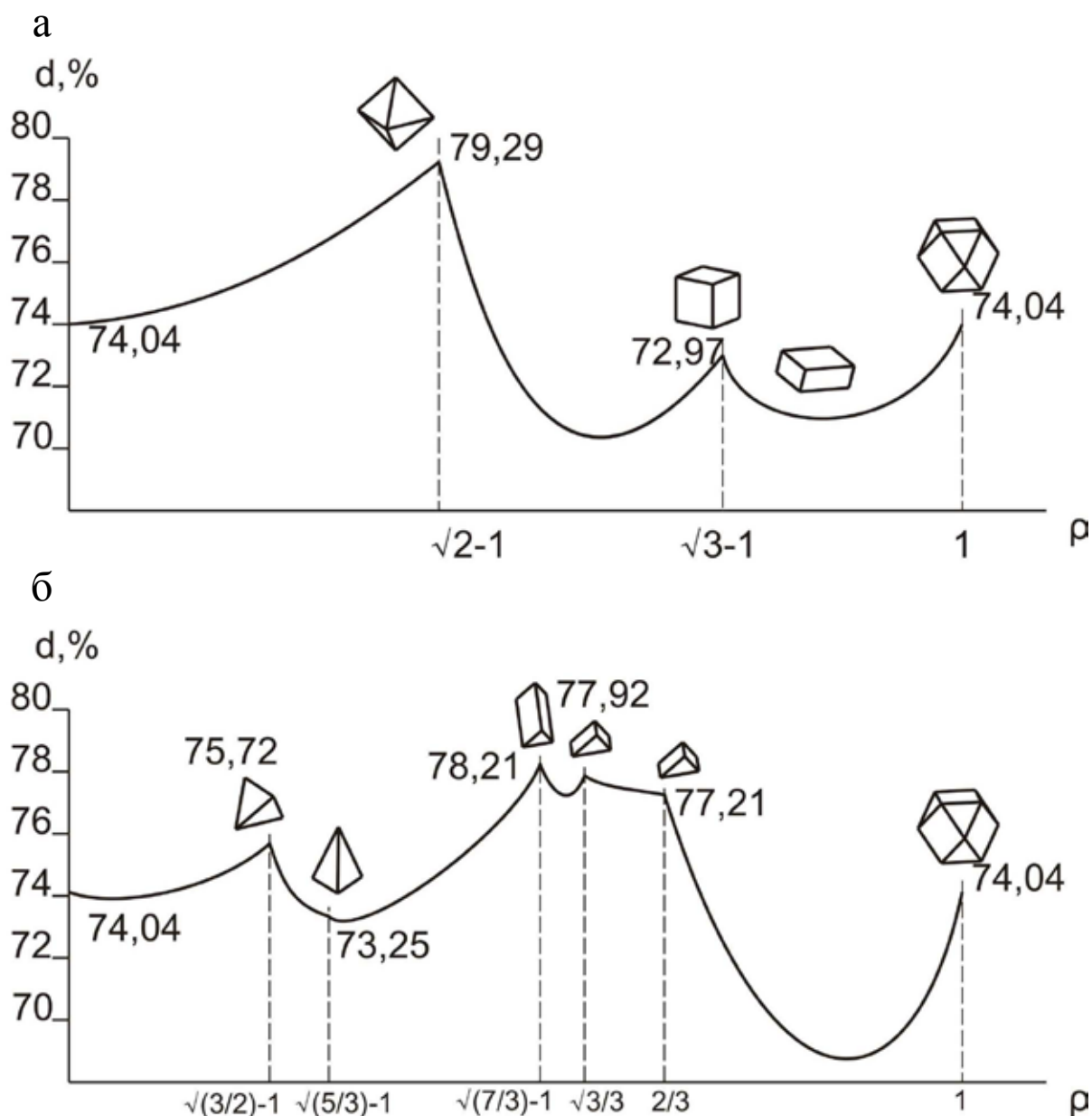


Рис. 1. Кривая плотности кубической ПУ с ростом ρ от 0 до 1.

атомами. Атом с этим радиусом ведёт себя как сфера. Этого не требуется доказывать для структур с классическими ПУ, а в структурах с «искажённой» ПУ действуют, вероятно, законы ρ -систем. Радиус r противоположного атома составляет разность между длиной связи и большим радиусом атома $r_A = l - R_B$ или $r_B = l - R_A$, где l – длина связи между А и В. Длины связи между парами атомов даны в [Бацанов, 2000]. Атом с радиусом r тоже ведёт себя как сфера, т. к. длина связи – величина постоянная. Эти расчёты показывают, что сферы с радиусами R одноимённых атомов и сферы радиусов R и r разноимённых атомов в кристаллической структуре касаются, а сферы с радиусами R разноимённых атомов пересекаются. Сферы радиусов r удалены друг от друга.

На существование пересекающихся сфер в кристаллических структурах к настоящему времени обратили внимание отечественные исследовате-

ли. Д.Б. Титоров [2001] подошёл с геометрических позиций и показал удобство строить модели структур, используя сферы с взаимно проникающими оболочками. В.Д. Игнатьев [2008] пришёл к возможности пересечения сфер (оболочек атомов) путём квантовых расчётов. Е.П. Макагонов [2011] использовал «взаимопроникающие сферы» для замены теории ПУ принципом эффективного покрытия пространства. С этих позиций им описано большое число кристаллических структур и структурных типов.

Сферы с радиусами R_A и r_B или R_B и r_A составляют плотнейшие бирадиальные упаковки. Поскольку малые радиусы обоих разноимённых атомов вычисляются из длины связи, то всякое бинарное соединение представляет собой две бирадиальных упаковки, сопряжённые через длину связи. Хотя бы одна из них является плотнейшей. О том, что катионы, как и анионы, имеют радиус R_K , влияющий на формирование структуры, говорит не только существование систем радиусов с большими катионами [Slater, 1964; Лебедев, 1969]. В работе [O'Keeffe, Hyde, 1978] показано, что Si в силикатах имеет радиус, благодаря которому тетраэдры $[SiO_4]$ могут соединяться только вершинами. Величину этого радиуса, названного ими одноугольным или радиусом отталкивания, в конкретных соединениях они вычислили из углов Si-O-Si. Позже Хайд опубликовал радиусы отталкивания атомов ещё нескольких элементов, отметил равноправие для радиусов катионов и анионов в соединениях, и на ряде примеров показал их фундаментальное значение [Hyde, 1986]. Он показал, что открытые радиусы, в отличие от длины связи, изменяются от соединения к соединению и под влиянием физико-химических условий. Длина связи изменяется меньше, чем радиусы отталкивания. Этим Хайд объяснил, почему в стишовите при высоких давлениях относительная величина большого радиуса O и малого радиуса Si изменяется настолько, что Si занимает в нём не тетраэдрическую, а октаэдрическую пустоту.

Разделяя точку зрения Хайда о фундаментальном значении радиусов отталкивания, автор вычислил их минимальные значения для всех элементов, данные о кристаллических структурах которых известны, и опубликовал таблицу, в которую включил данные других систем радиусов [Раменская, 1990]. Там же приведены методы расчётов и формулы и впервые высказана мысль о сопряжённых упаковках. Позже [Раменская, 2008] таблица дополнена новыми данными (табл. 1).

На том основании, что геометрическую теорию бирадиальных упаковок начала разрабатывать М. Холлай, а фундаментальное значение радиусам отталкивания R в кристаллических структурах на многих примерах показал Б.Д. Хайд, мы предлагаем назвать эти радиусы радиусами Хайда-Холлай или *НН*-радиусами. Сферы с *НН* радиусами, видимо, являются сферами равновесия между отталкиванием атомов и силой связи кристаллической структуры в целом, это аналог Ван-дер Ваальсовых радиусов внутри структуры. Таким образом, *НН* радиусы являются размерами атомов в данной структуре в данных условиях. Малым сферам упаковки, радиусы r которых являются разно-

стью между длиной связи и *НН*-радиусом другого атома, никакое физическое тело не соответствует. Чтобы рассуждать о диффузии атомов такого размера через кристаллическую структуру, надо признать, что в процессе диффузии этот атом по очереди связывается с теми атомами, мимо которых проходит.

Таблица 1. Минимальные радиусы отталкивания, Ван-дер-Ваальсовы радиусы и 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		
H 1.16 ⁵							He		
Li 1.15 2.2	Be 1.34 1.39 ⁴ 1.9 ⁵	B 1.29 1.33 ⁴ 1.8 ⁵	C 1.25 ⁴ 1.71 ⁵	N 1.14 ⁴ 1.50 ⁵	O 1.13 ⁴ 1.29 ⁵	F 1.08 ⁴ 1.33 ⁵	Ne		
Na 1.39 2.3 ⁵	Mg 1.48 2.0 ⁵	Al 1.55 ¹ 1.63 ⁴ 2.0 ⁵	Si 1.57 1.55 ⁴	P 1.54 1.46 ⁴	S 1.45 ⁴ 2.15 ⁵	Cl 1.44 ⁴ 1.90 ⁵	Ar		
K 1.61 2.7 ⁵	Ca 1.70 ¹ 2.4 ⁵	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 1.9 ⁵	Zn 1.62 1.9 ⁵	Ga 1.40 1.63 ⁴ 2.1 ⁵	Ge 1.43 1.58 ⁴	As 1.58 ⁴ 1.91 ⁶	Se 1.58 ⁴ 1.93 ⁶	Br 1.94 1.97 ⁵	Kr		
Rb 1.68 2.8 ⁵	Sr 1.82 2.6 ⁵	Y 1.76 2.3 ⁵	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 2.0 ⁵	Cd 1.30 2.1 ⁵	In 1.68 2.2 ⁵	Sn 1.58	Sb 1.97 2.08 ⁵	Te 1.80 2.11 ⁶	J 2.12 1.97 ⁵	Xe		
Cs 1.84 2.9 ⁵	Ba 1.95 2.6 ⁵	La 1.86 2.3 ⁵	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 2.0 ⁵	Hg 1.73 2.0 ⁵	Tl 1.76 3.4 ⁵	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: Вычислено из соединений металла: ¹с N, ²с S, ³с Р, ⁴ по Хайду и О'Кифу [1978, 1986], ⁵ по [Зефилов и др., 2000], ⁶ радиусы анионов по [Бокий, 1956]. Числа в скобках получены из числа соединений, недостаточного для вывода о том, что радиус является минимальным.

Коль скоро *НН*-радиусы (радиусы отталкивания *R*) являются аналогами Ван-дер Ваальсовых, чисто геометрическое деление длины связи, опирающееся на величину радиусов отталкивания *R*, не имеет отношения к взаимодействию валентных электронов и определению вклада атома в длину связи. Задача поисков этого вклада, не решённая до сих пор, к ПУ отношения не имеет. Быть может, можно построить непротиворечивую систему радиусов, разбив в соединении, с которого начат расчёт, длину связи в любой точке. «В.С. Урусов [1971] считает, что довольно безразличны абсолютные значения радиусов, если они согласованы внутри системы». Попытки привязать расчёт доли атома в длине связи к ПУ привели к противоречиям теории ПУ в кристаллохимии, которые практически заставили от неё отказаться [Белов и др., 1977]. Исходя из описания структуры в виде сопряжённых бирадиальных упаковок, где роль больших сфер играют катионы и анионы, первое правило Полинга следует переформулировать так: бинарная кристаллическая структура $A_m B_n$ определяется *НН*-радиусами атомов *A* и *B* и длиной связи между ними l_{AB} .

Связь с классическими представлениями и возможность прогнозов

В бирадиальных упаковках, как и в классических, соотношением между реальными радиусами большей и меньшей сфер определяется координационный многогранник меньшей сферы. В бирадиальной упаковке атом занимает тетраэдрическую пустоту, если $r_B = l - R_A = 0.2247R_A$, но и если $l - R_B = 0.2247 R_B$, и октаэдрическую, если $l - R_A = 0.4142R_A$ $l - R_B = 0.4142 R_B$. Теория *p*-систем добавляет, что атом приобретает кубическую координацию, если $l - R_{A,B} = 0.73205 R_{A,B}$. В соответствии с представлением о паре сопряжённых упаковок и геометрической теорией *p*-систем, соотношением между радиусами сфер отталкивания определяется тип упаковки (*ккк* или *гг*). В более сложных, чем бинарные, соединениях им определяется тип слоя *к* или *г*. Так, формирование у соединений AX_2 структурного типа флюорита либо рутила определяется не только соотношением *НН* радиусов и длиной связи (какой к.м. займёт атом с радиусом *r*), но и соотношением *НН* радиусов двух сопряжённых упаковок. Из табл. 2 видно, что в случае структурного типа флюорита-антифлюорита расстояния между сферами *p* составляет в $\sqrt{2}$ раз меньше, чем между единичными сферами, а в структуре рутила-антирутила – в 2 раза меньше (рис. 2).

Таблица 2. Расстояния между центрами сфер в бирадиальных упаковках.

Упаковка	Трёхслойная (кубическая)					Любая	Двухслойная (гексагональная)	
							Октаэдрическая	Тетраэдр
Пустота								
Момент смены симметрии	I	II	I	II	III	Последний	I	II
Координационный полиэдр	Октаэдр правильный	Куб	Тетраэдр правильный	Тетраэдр с прямым двугранным углом	Тригональная призма	Кубооктаэдр	Октаэдр правильный	Октаэдр, вытянутый по оси 4
Расстояния: от большой сферы	$\sqrt{2}$ 1.4142	$\sqrt{3}$ 1.7320	$\sqrt{3/2}$ 1.2247	$\sqrt{5/3}$ 1.2100	$\sqrt{7/5}$ 1.1832	2 2.000	$\sqrt{2}$ 1.4142	$\sqrt{2}$ 1.4142
От центра октаэдрической пустоты	2 2.000	2 2.000	$\sqrt{3/2}$ 1.2247	2 2.000	Не опр.	2 2.000	$\sqrt{2/3}$ 0.8165	$2\sqrt{2}$ 2.8284
От центра тетраэдрической пустоты	$\sqrt{3/2}$ 1.2247	–	$\frac{1}{2}$ 0.5000	$2/3$ 0.6667	2 2.000	2 2.000	$\sqrt{3/2}$ 1.2247	Не опр
Источник	Правила Магнуса-Гольдшмидта	Галиулин, 1984	Правила Магнуса-Гольдшмидта	Hollai, 1981	Hollai, 1981	Hollai, 1981	Правила Магнуса-Гольдшмидта	Уэллс, 1984
								Правила Магнуса-Гольдшмидта

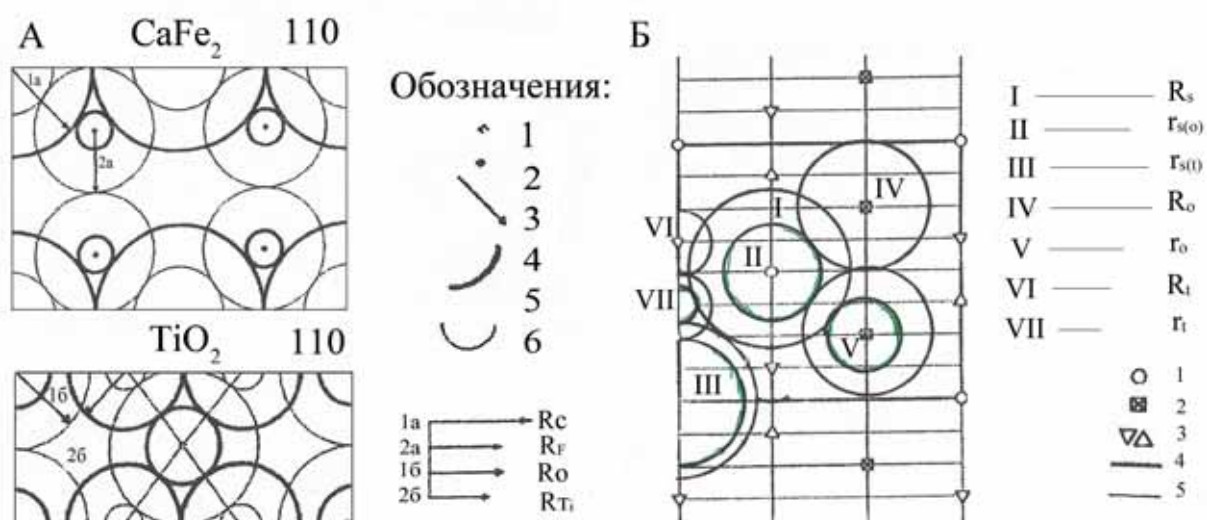


Рис. 2. Соотношение величин в кубической и гексагональной ПУ. А. Соотношение радиусов R и r в структурных типах CaF_2 и TiO_2 . В. Соотношения величин в классической гексагональной ПУ. I – VII: радиусы сфер и пустот и их относительные размеры. I – R сфер; II – r сфер по отношению к октаэдрической пустоте; III – r сфер по отношению к тетраэдрической пустоте; IV – R октаэдрической пустоты; V – r октаэдрической пустоты; VI – R тетраэдрической пустоты; VII – r тетраэдрической пустоты. 1-3 – центры позиций: 1 – сфера; 2 – октаэдрическая пустота; 3 – тетраэдрические пустоты в двух ориентировках. 4 – граница элементарной ячейки; 5 – след плоскости (0001), в которой находятся центры сфер или пустот.

Прогнозы по табл. 2 затрудняет непостоянство $НН$ -радиусов. Более определённый прогноз даст табл. 3, позволяющая судить о возможности заполнения соседних пустот между единичными сферами в оксидах и сульфидах. Исходные коэффициенты взяты из [Уэллс, 1987, с. 156].

Таблица 3. Минимальные радиусы металлических атомов, при которых возможно образование многогранников, соединённых вершинами, вдоль рёбер или по граням.

	Коэф. по Уэлсу	R атома металла при R атома неметалла					
		Кислорода			Серы		
		1.13 ¹	1.30 ²	1.40 ³	1.45 ¹	1.56 ²	1.85 ³
Тетраэдры с общими вершинами, рёбрами, гранями	1.22	1.38	1.59	1.71	1.77	1.90	2.25
	0.71	0.80	0.92	0.99	1.03	1.11	1.31
	0.41	0.46	0.53	0.56	0.59	0.64	0.76
	0.22	0.24	0.28	0.30	0.31	0.34	0.40
То же для октаэдров	1.41	1.59	1.83	1.97	2.04	2.26	2.61
	1.00	1.13	1.30	1.40	1.45	1.56	1.985
	0.82	0.93	1.07	1.12	1.19	1.30	1.52

Примечания: ¹ см. таблицу в настоящей работе, ² ионные радиусы по [Wittaker, Muntue, 1970], ³ Ван-дер-Ваальсовы радиусы по [Бокий, 1960].

Рассмотрены возможности для HH -радиусов O и S , ионных радиусов по [Wittaker, Muntus, 1970] и Ван-дер Ваальсовых радиусов Полинга по [Бокий, 1954]. Если HH радиус катиона превышает приведённую в таблице величину, правильные многогранники соединиться не могут, либо соответствующие катионы связаны химически. Так, ни одна из систем радиусов не допускает к.м. AO_4 , соединённых гранями или рёбрами. Такое соединение может быть лишь в случае сильного искажения многогранников. Правильные октаэдры AO_6 могут соединяться рёбрами лишь в случаях, если A составляет Li , Be или B (но с их атомами O образует тетраэдры), Na , Fe , Co или Pt . Что касается S , то тетраэдры AS_4 , заключающие Li и B , могут соединяться рёбрами, октаэдры – даже гранями. Практически все металлы первых трёх периодов Периодической системы позволяют правильным октаэдрам из атомов S соединяться рёбрами. По-видимому, это обстоятельство «разрешает» кристаллизоваться многим сульфидам в гексагональной упаковке. Между тем, известно, что в SiS_2 тетраэдры SiS_4 соединены рёбрами в цепочки. По-видимому, внутри цепочек есть связь $Si-Si$, так как иначе R_{Si} составил бы $1.38\text{\AA}$ (в табл. 1 он равен $1.55\text{\AA}$). Расстояние $Si \dots Si$ между цепочками составляет $3.5\text{\AA}$.

Вновь возникшие задачи

Первая задача – продолжение разработки теории p -систем. Она создана только для кубической упаковки. Её необходимо разработать для гексагональной упаковки. В частности, лишь рассмотрение гексагональной упаковки позволит найти место в теории ПУ структурному типу рутила. Согласно классической кристаллографической теории, ПУ упаковка с малыми сферами, имеющими радиус меньше разрешённого правилами Магнуса-Гольдшмидта, невозможна. Согласно теории p -систем, от нуля до касания малыми сферами больших упаковка не изменяется. Если считать, что имеют место две упаковки, сопряжённые через длину связи, возникает нетривиальная задача: что будет с сопряжёнными упаковками, если длина связи уменьшится до того, что $l - R$ приблизится к нулю? Как реальные структуры кристаллов показали Н.В. Белову существование неклассических к.м., так структуры льда и силикатов показывают, что, перейдя запрет Магнуса-Гольдшмидта в меньшую сторону, структура $A_n B_m$ приобретёт направленные связи и станет ажурной. Дальнейшее сокращение длины связи, возможно, приведёт к изоляции атомных групп, образующих к.м., возникновению комплексных ионов или молекул. Решение обеих задач расширит геометрическую базу кристаллохимии и возможности прогноза для бинарных и более сложных кристаллических структур.

Заключение

Сопряженностью двух упаковок, образующих структуру бинарного соединения, можно объяснить, почему даже при малом числе атомов они

складываются в группы, являющиеся частью соответствующей кристаллической структуры. Таковы некоторые активные центры ферментов [Федонкин, 2008]. Возможно, обращение к описанной точке зрения поможет с геометрических позиций решить проблему строительных единиц в теории роста кристаллов. Вероятно, те же законы действуют и для более сложных соединений.

В заключение хочу поблагодарить всех, без кого настоящая работа была бы невозможной: Р.В. Галиулина за организацию доклада М. Холлай на Фёдоровской сессии 1979 г.; организаторов Фёдоровских сессий, VI Всесоюзного симпозиума по изоморфизму и Беловских чтений в Нижегородском университете за возможность изложить идею в 1983, 1988 и 2005 гг. [Раменская, 1988, 2005]; Ю.В. Зефирова, поддержавшего идею и подсказавшего, что *НН*-радиусы являются аналогами Ван-дер Ваальсовых; В.М. Винокурова, предоставившего место в сборнике кафедры для первой публикации статьи о сопряжённых упаковках [Раменская, 1990]; С.В. Борисова за вопросы, показавшие, что уменьшение длины связи ниже разрешённой правилами Мангуса-Гольдшмидта представляет отдельную задачу. Наконец, благодарю Ю.Л. Войтеховского, на «математических школах» которого работа шлифовалась и приняла окончательный вид [Раменская, 2006; 2009; 2010], и который взял на себя труд её окончательного редактирования.

Список литературы

1. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. М.: Диалог-МГУ, 2000. 292 с.
2. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во АН СССР, 1947. 237 с.
3. Белов Н.В., Бокий Г.Б., Франк-Каменецкий В.А. и др. Что нового в так называемой «новой кристаллохимии»? // Изв. АН СССР. Сер. геол. 1977. № 3. С. 136-146.
4. Игнатьев В.Д. Атомные радиусы, взаимопроницаемые атомы и прочность химической связи. Сыктывкар: Геопринт, 2008. 40 с.
5. Лебедев В.И. Ионно-атомные радиусы и их значение для геохимии и химии. Л.: Изд-во ЛГУ, 1969. 156 с.
6. Макагонов Е.П. Распределение структур минералов, основанных на принципе эффективного покрытия пространства взаимопроницающими сферами, в геологических объектах // Матер. VI Всерос. совещ. «Минералогия Урала». Миасс, 22-26 авг. 2011 г. Миасс-Екатеринбург, 2011. С. 68-73.
7. Раменская М.Е. О понятии «сферы отталкивания одноимённых ионов в кристаллах» // Тез. докл. VI Всес. симп. по изоморфизму. Звенигород, 27 нояб. – 2 дек. 1988 г. М.: Изд-во МГУ, 1988. С. 171.
8. Раменская М.Е. О понятии «сферы отталкивания одноимённых ионов в кристаллах» // Спектроскопия, кристаллохимия и реальная структура минералов и их аналогов. Казань: Изд-во КГУ, 1990. С. 153-171.

9. Раменская М.Е. Новое о плотнейших шаровых упаковках // Тез. докл. XXIV научн. чтений им. акад. Н.В. Белова. Москва, 19-20 дек. 2005 г. М.: Изд-во МГУ, 2005.
10. Раменская М.Е. Новое о плотнейших шаровых упаковках // Тр. II Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии», Апатиты, 16-17 окт. 2006 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2006. С. 73-84.
11. Раменская М.Е. Взаимодействия кристаллов со средой: структурно-геометрический анализ. М.: Изд-во МГУ, 2008. 240 с.
12. Раменская М.Е. Структуры бинарных соединений как бирадиальные упаковки // Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. Апатиты: К & М, 2009. С. 66-74.
13. Раменская М.Е. Две кристаллографические задачи для геометров // Тр. VI Всерос. (с межд. участием) научн. школы «Математические исследования в естественных науках» памяти д.ф.-м.н. Р.В. Галиулина. Апатиты, 24-27 окт. 2010 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2010. С. 59-63.
14. Титоров Д.Б. Формирование плоских и пространственных структур из сферических тел с взаимно проникающими оболочками // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 1. С. 25-27.
15. Урусов В.С. О физическом смысле различных систем радиусов атомов и их роли в решении вопросов изоморфизма // Проблема изоморфных замещений атомов в кристаллах. М.: Наука, 1971. С. 12-31.
16. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т. I. М.: Мир, 1987. 407 с.
17. Федонкин М.А. Роль водорода и металлов в становлении и эволюции метаболических систем // Проблемы зарождения и эволюции биосферы. М.: Книжный дом ЛИБРОКОМ, 2008. С. 417-438.
18. Холлай М. Непрерывный переход между структурными типами в свете плотнейших упаковок из сфер разного радиуса // Тр. II Всерос. научн. школы «Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии». Апатиты, 16-17 окт. 2006 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2006. С. 85-86.
19. Hollai M. Das dichteste Gitterförmige ρ -system der Kugeln // Ann. Univ. Sci. Budapest. Sect. Math. 1981. B. 24. S. 157-160.
20. Hyde B.G. Inorganic and mineral structures reconsidered // J. Proc. Roy. Soc. New South Wales. 1986. N 3-4. P. 153-164.
21. Misin O.R., Tarasov A.S. As the strong thirteen spheres problem archiv 1002. Submitted on 7 Feb. 2010, last revised 21 Jul. 2010.
22. O'Keeffe M., Hyde B.G. On Si-O-Si configuration in silicates // Acta Cryst. 1978. B34. N 1. P. 27-32.
23. Slater J.S. Atomic radii in Crystals // J. Chem. Phys. 1964. V. 41. N 10. P. 3199-3205.
24. Wittaker E.J., Muntus R. Ionic radii for use in geochemistry // Geochem. Cosmochem. Acta. 1970. V. 34. P. 945-956.

СТРУКТУРНЫЕ ДЕФОРМАЦИИ ФУЛЛЕРЕНОВ И ГРАФЕНА: ОБЗОР МЕТОДОВ ИЗУЧЕНИЯ

Степенщиков Д.Г.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru

Идеальный графен представляет собой бесконечный, одиночный слой из атомов углерода, упорядоченных в гексагональной решётке. Формально, это структурная часть графита – один из слоёв, сложенных в пачку-кристалл. В реальности имеют дело с конечными фрагментами графена, изучая свойства их локальных участков, удалённых от краёв (рис. 1). Фуллерен тоже образован атомами углерода и имеет решётчатое строение, но его решётка замкнута в пространстве. Кроме 6-угольных, атомы углерода с необходимостью образуют 5-угольные циклы (рис. 1). Наиболее известны фуллерены C_{60} и C_{70} , но теоретически возможно бесконечное разнообразие фуллеренов с разным числом атомов и разным строением решётки. Небольшая часть этого многообразия синтезирована.

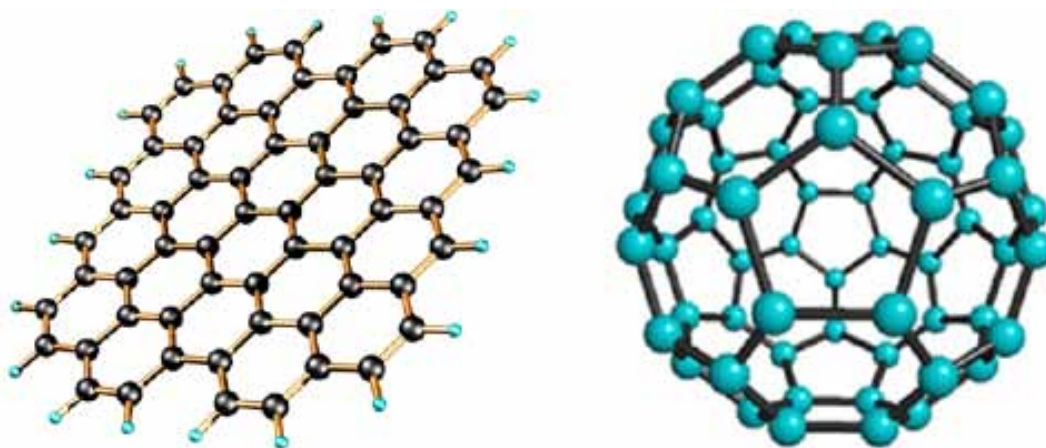


Рис. 1. Графен и фуллерен C_{60} .

Поверхность графена в силу тех или иных воздействий бывает не идеальной: на ней появляются дефекты – разрывы и не гексагональные циклы (4-, 5-, 7-, ... n-угольники), вызванные вырыванием части атомов углерода с поверхности (рис. 2). «Неправильные» циклы всегда образуются группой, не менее двух, за счёт перераспределения связей между атомами.

На фуллерене присутствуют 5-угольники, благодаря которым он замыкается в квазисферическую структуру. У любого «нормального» (т.е. только с 5- и 6-угольными циклами) фуллерена пятиугольных циклов ровно 12 независимо от числа образующих его атомов. Появление 4-, 7-, 8-угольных и т.д. циклов на фуллерене изменяет и число 5-угольных циклов в большую или меньшую сторону. С поверхности фуллерена, как и с листа графена, могут быть вырваны атомы углерода, что приводит к изменению структуры его решётки и размера (рис. 3).

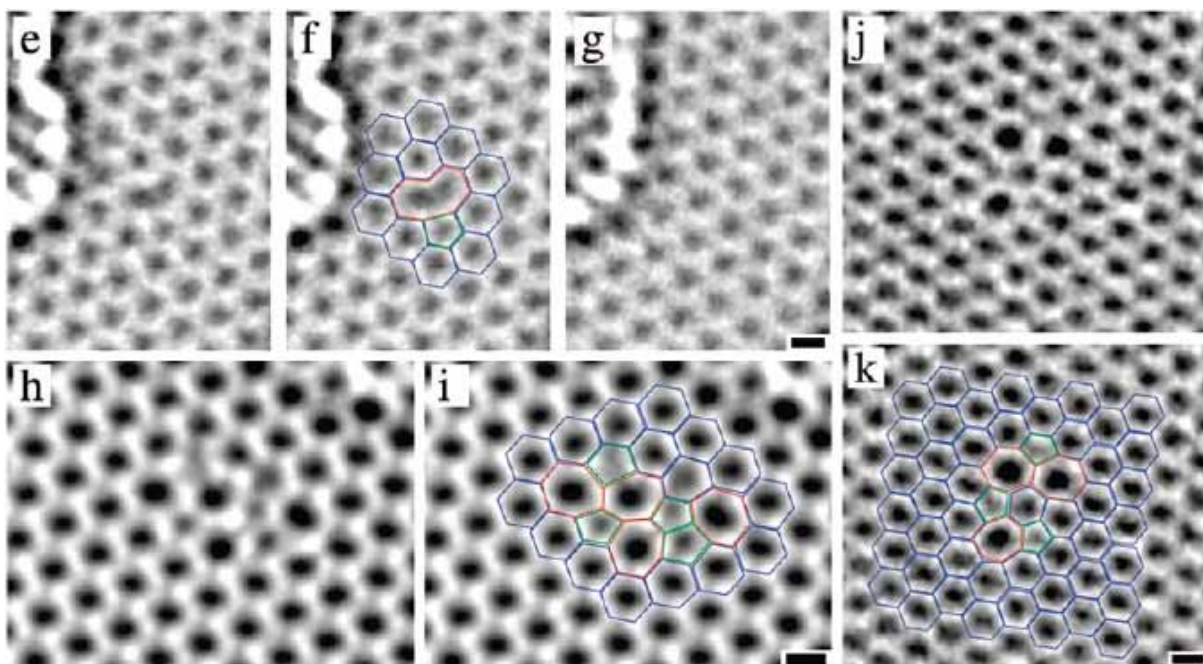


Рис. 2. Искривлённая поверхность графена [9].

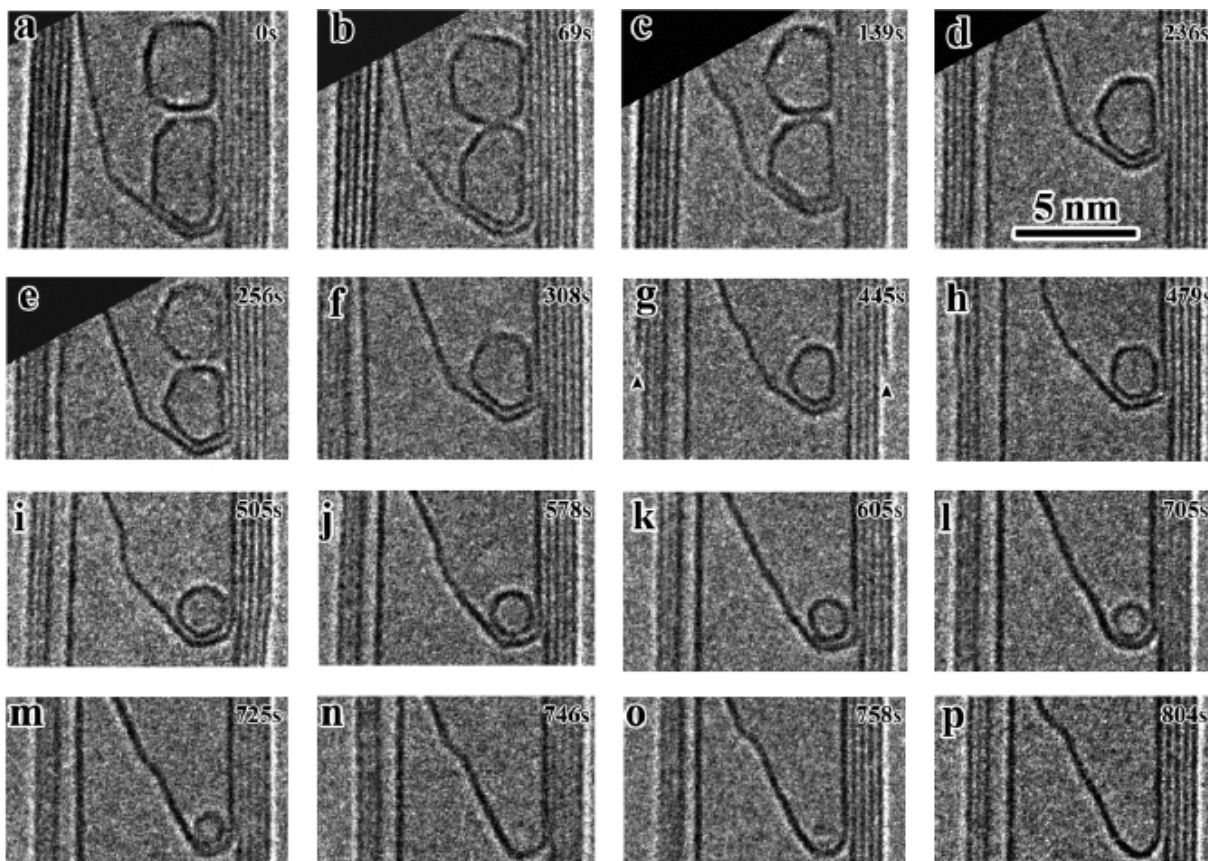


Рис. 3. Динамика изменения фуллерена в результате испарения атомов углерода [8].

Таким образом, графен представляет собой двумерную, неограниченную и бесконечную структуру, в то время как фуллерен – с одной стороны, двумерную, неограниченную и конечную структуру, а с другой – трёхмерный, ограниченный и конечный объект. В рамках этой статьи самым интересным является то, что фрагмент дефектного графена можно отождествить с фрагментом поверхности фуллерена и наоборот.

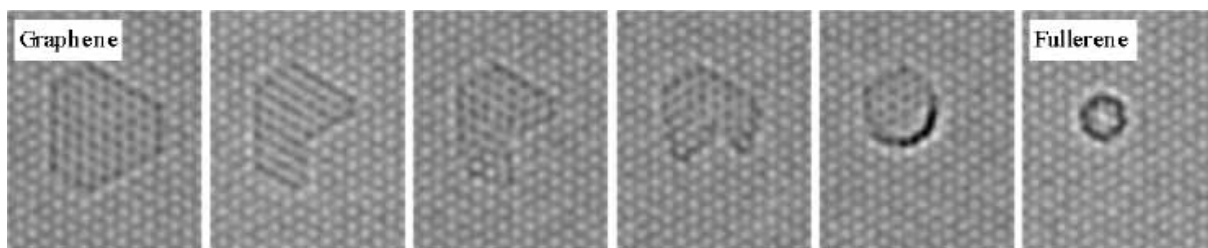


Рис. 4. Образование фуллерена из фрагмента графена [5].

Графен впервые был получен путём отслаивания одного «листа» из «пачки» графита [10]. Механизм образования фуллеренов долгое время оставался неясным. Предлагались разные модели: образование из некоторого набора начальных фрагментов, сворачивание цепочек атомов, рост из зародыша-кластера, замыкание фрагмента графеновой поверхности. Последняя модель получила экспериментальное подтверждение (рис. 4). Это можно рассматривать как ещё одну генетическую связь между графеном и фуллеренами.

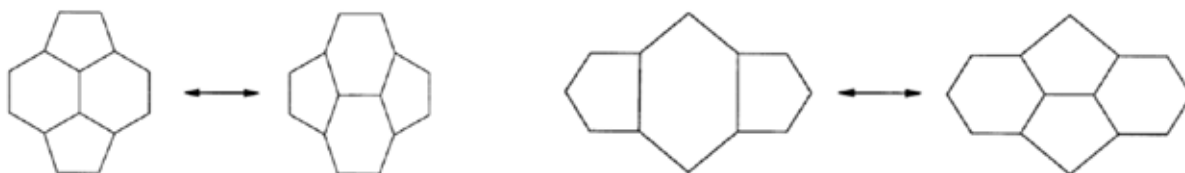


Рис. 5. Трансформация Стоуна-Уолеса и операция Эндо-Крото.

Возникновение дефектов на поверхности графена или фуллерена может происходить как в процессе их получения, так и после – при воздействии внешних факторов, например, температуры или электронного пучка. Не рассматривая природу дефектов, ряд авторов изучает принципиальный механизм изменения структуры углеродной решётки. Самый первый механизм разработан Стоуном и Уолесом и назван по имени авторов трансформацией Стоуна-Уолеса или SW-трансформацией (рис. 5, слева) [11]. Она заключается в перераспределении двух связей между атомами и является самой простой и, по-видимому, минимально энергозатратной операцией. Похожа и операция Эндо-Крото, названная по имени авторов [6], но отличающаяся тем, что в решётку встраиваются два дополнительных атома (рис. 5, справа). Если рассматривать её в обратную сторону, то атомы вырываются из решётки. Таким образом, операция Эндо-Крото может описывать рост и деградацию структуры.

Оба механизма могут быть реализованы только при условии близкого расположения 5-угольных циклов: смежны, соединены ребром или смежны с 6-угольным циклом по противоположным сторонам. Для иных случаев было придумано обобщение трансформации Стоуна-Уолеса [1, 2]. В этом случае трансформации подвергается определённый фрагмент решётки между двумя 5-угольными циклами (рис. 6). Этот фрагмент может иметь любую длину и включать в себя другие 5-угольные циклы. Минимальной длине фрагмента соответствует обычная SW-трансформация.

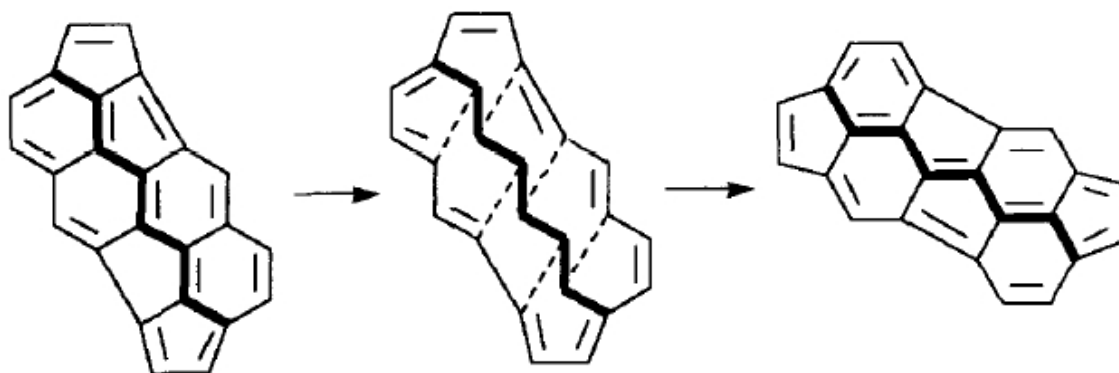


Рис. 6. Обобщение трансформации Стоуна-Уолеса.

Во всех случаях внешняя граница фрагментов, на которых выполняются изменения решётки, остаётся той же. Суть трансформации сводится к «вырезанию» фрагмента решётки и «вклеиванию» на его место нового фрагмента с тем же контуром. Подобный подход развит в [3, 4] и сводится к перечислению всевозможных фрагментов-патчей с одинаковой границей. Его недостатком является необходимость обширных каталогов. На примере фуллеренов, в минимальном предельном случае получаем SW-трансформацию или операцию Эндо-Крото, в максимальном предельном случае (фрагмент – вся поверхность) – задачу перечисления всего многообразия фуллеренов. Существует ряд других подходов, связанных с трансформациями графена и фуллеренов. Часть из них – вариации уже рассмотренных, часть – абстрактные геометрические преобразования, не имеющие отношения к реальным процессам.

Автором предлагается новый механизм структурной деформации – возле некоторого 5-угольного цикла образуется дефект определённой конфигурации (рис. 7). При этом 5-угольный цикл меняет своё положение. Дефект может перемещаться по решётке в нескольких направлениях, причём некоторые из них сопровождаются увеличением, другие – уменьшением числа атомов углерода в структуре (рис. 8). После того как дефект дойдёт до другого 5-угольного цикла, он устраняется в порядке, обратном первоначальному, меняя при этом положение конечного 5-угольного цикла.

Механизм требует для образования дефекта одного 5- и двух 6-угольных попарно смежных циклов, а также возможности перемещения дефекта по



Рис. 7. Образование дефекта (синее).

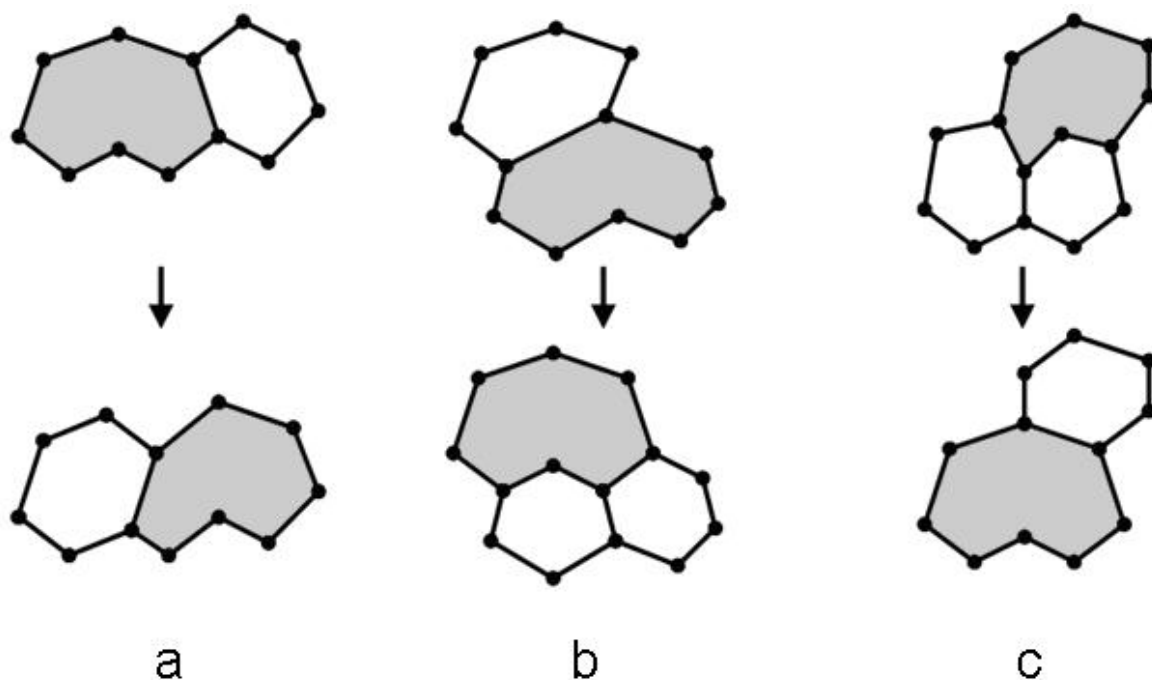


Рис. 8. Различные типы смещения дефекта с сохранением (a), увеличением (b) и уменьшением (c) числа атомов на 2.

решётке до следующего 5-угольного цикла и устранения дефекта возле него. Лучше всего это выполняется в случае, когда 5-угольные циклы находятся в гексагональной решётке на большом расстоянии друг от друга, например, на гигантских икосаэдрических фуллеренах. Как и рассмотренные выше механизмы изменения углеродной решётки, этот механизм не меняет границу фрагмента, в пределах которого происходит образование, перемещение и устранение дефекта. SW-трансформация – частным случаем рассматриваемого механизма, так как удовлетворяет необходимым условиям, а операция Эндю-Крото – нет, поскольку соответствующий ей фрагмент решётки содержит один 6-угольный цикл или два несмежных.

Число различных способов образования дефекта вблизи выбранного 5-угольного цикла зависит от числа примыкающих к нему 6-угольных циклов и варьирует от 10 (когда он окружен только 6-угольными циклами) до нуля (6-угольные циклы попарно не смежны или отсутствуют).

Сдвиг дефекта по углеродной решётке напоминает движение краевой дислокации в решётке кристалла. Возможность такого дефекта и рассматриваемого механизма подтверждается наблюдениями комбинаций 7- и 5-угольных циклов и их движения в графене (рис. 9). Дефект вместе с 6-членным циклом, примыкающим к свободному от одной связи атому, может быть заменён на такую комбинацию (рис. 10).

Предлагаемый механизм изменения структуры углеродной решётки графена и фуллеренов представляется практически труднореализуемым, так как имеет многоэтапный характер. Но он имеет интересные теоретические приложения. Так, по аналогии с использованием SW-трансформации для классификации фуллеренов-изомеров [7], он может быть применён для от-

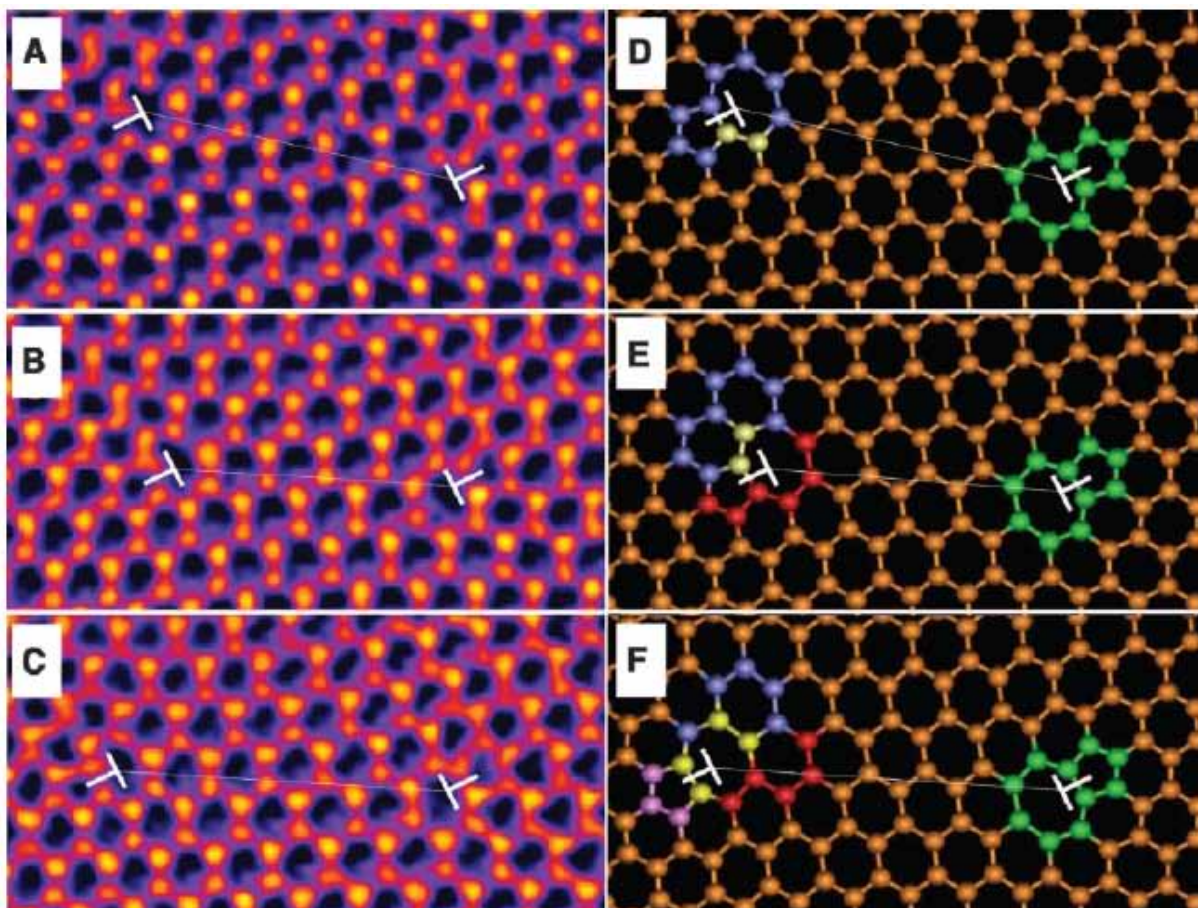


Рис. 9. Две комбинации 5- и 7-угольного циклов и их движение в графене [12].

слеживания генетической связи между фуллеренами-изомерами и их классами по числу атомов. Многократное использование механизма на фрагменте с постоянной внешней границей позволяет выводить все возможные фрагменты, сводя задачу к перечислению патчей. Кроме этого, особенности образования дефекта, его перемещения, повторного использования и т.п. могут привести к выводу ряда интересных свойств и теорем.

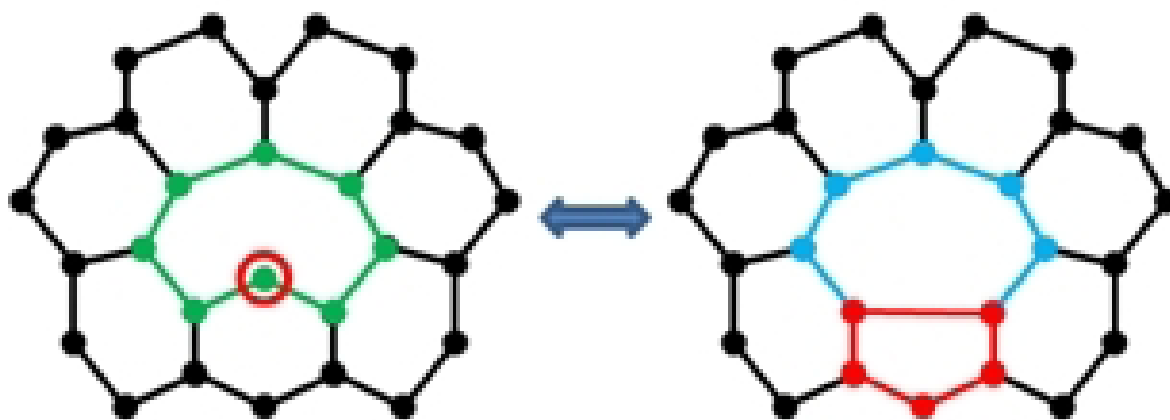


Рис. 10. Связь между дефектом (зелёное) и комбинацией 7-угольного цикла (синее) с 5-угольным (красное).

Список литературы

1. Babić D., Bassoli S., Casartelli M. et al. Generalized Stone-Wales transformations // *Molecular Simulation*. 1995. V. 14. P. 395-401.
2. Balaban A.T., Schmalz T.G., Zhu H. et al. Generalizations of the Stone-Wales rearrangement for cage compounds, including fullerenes // *J. Mol. Structure*. 1996. V. 363. P. 291-301.
3. Brinkmann G., Fowler P.W., Justus C. A catalogue of isomerization transformations of fullerene polyhedra // *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* 2003. V. 43. P. 917-927.
4. Brinkmann G., Fowler P.W. A catalogue of growth transformations of fullerene polyhedra // *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* 2003. V. 43. P. 1837-1843.
5. Chuvilin A., Kaiser U. et al. Direct transformation of graphene to fullerene // *Nature Chem.* 2010. V. 2. N 6. P. 450-453.
6. Endo M., Kroto H.W. Formation of Carbon Nanofibers // *J. Phys. Chem.* 1992. V. 96. P. 6941-6944.
7. Fowler P.W., Manolopoulos D.E., Ryan R.P. Isomerisations of the fullerenes // *Carbon*. 1992. V. 30. N 8. P. 1235-1250.
8. Huang J.Y. Real time microscopy, kinetics and mechanism of giant fullerene evaporation // *Phys. Rev. Lett.* 2007. V. 99. P. 1-4.
9. Meyer J.C., Kisielowski C. et al. Direct imaging of lattice atoms and topological defects in graphene membranes // *Nano Lett.* 2008. N 8 (11). P. 3582-3586.
10. Novoselov K.S., Geim A.K. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. N 306. P. 666-669.
11. Stone A.J., Wales D.J. Theoretical studies of icosahedral C_{60} and some related species // *Chem. Phys. Lett.* 1986. V. 128. P. 501-503.
12. Warner J.H. et al. Dislocation-driven deformations in graphene // *Science*. 2012. N 337. P. 209-212.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО КОЛИЧЕСТВЕННОГО ПОКАЗАТЕЛЯ ФОРМЫ КРИСТАЛЛА

Страшненко Г.И.

г. Екатеринбург, strashnenko_gi@mail.ru

Статья 1. РАСЧЕТ F-ФУНКЦИИ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

В настоящее время форма кристалла описывается с помощью таких понятий как огранение, габитус, облик. Но в научной литературе нет их однозначного понимания. Особенно часто путают габитус и облик. Поэтому дадим строгое определение этих понятий.

Огранение – совокупность наблюдаемых на кристаллическом полиэдре простых форм (ПФ). Описание огранения даёт перечень ПФ или их символов, обычно расположенных в порядке убывания значимости.

Габитус определяется преимущественным развитием на полиэдре одной, двух, реже трёх простых форм. Записывается в виде перечня ПФ или ряда их символов.

Облик обычно определяется преимущественным развитием граней одной ПФ. Так, для кристаллов кубического габитуса облик может быть: столбчатый при преимущественном развитии четырёх граней одного пояса; пластинчатый при преимущественном развитии двух противоположных граней одного пояса; изометричный при равномерном развитии всех граней.

Различие огранения и габитуса, с одной стороны, и облика с другой имеет принципиальную генетическую природу, что не должно допускать смешивание понятий. Огранение и габитус кристалла определяются физическими и химическими условиями среды. Из теоретически возможных в данной пространственной группе ПФ при фиксированных физико-химических условиях среды на полиэдре реализуется лишь часть из них. Изменение огранения и габитуса кристалла в процессе роста является реакцией его пространственной группы на изменение условий минералообразования. Облик кристаллов определяется отклонением симметрии питающего потока от сферической, вызванным влиянием силы тяжести для случая замедленного диффузионного массопереноса, либо геометрии природного кристаллизатора. Достоинством описания формы кристаллов названными категориями является наглядность. Достаточно взглянуть на ряд символов, которыми записано огранение и габитус кристалла, чтобы зрительно представить его форму. Существенным недостатком категорий является их качественная природа, невозможность использовать математический аппарат для описания непрерывного изменения формы кристалла.

С целью устранения этих недостатков автор задался целью вывести количественный интегральный показатель формы кристалла. Он должен

удовлетворять следующим требованиям: быть непрерывной функцией на интервалах изменения линейных и угловых параметров кристалла, устанавливаемых его классом симметрии; не зависеть от объёма кристалла; не зависеть от искажения идеальной (математической) формы кристалла за счёт отклонения симметрии питающего потока от сферической; определяться с точностью измерения линейных и угловых параметров; легко определяться с использованием справочной информации и простейших измерительных приборов, что важно для полевых минерагенических исследований. Этим требованиям полностью удовлетворяет предлагаемая приведённая поверхность кристалла. Назовем её F - функцией и определим следующим образом: **приведённая поверхность (F-функция) есть полная поверхность кристалла, объём которого равен 1.**

Обоснованность выбора поверхности кристалла в качестве интегрального показателя формы подтверждается тем, что именно она является границей раздела двух фаз, на которой происходит встраивание атомов и ионов в регулярную структуру твёрдого тела. Процессы на поверхности кристалла, наряду со скоростью массопереноса в жидкой или газовой фазе, контролируют скорость роста граней разных ПФ и определяют форму кристалла. Поверхность является обязательным элементом в теориях роста Кюри, Вульфа, Нойеса-Уитни, Нернста, Бертауда [2]. Ниже дан вывод F -функции. Предварительно определим символы геометрических параметров кристалла: V – объём, S_t – полная поверхность, S_i – площадь i -ой грани, n_i – нормаль, проведённая из центра кристалла к i -ой грани, k -количество граней, φ_i , ρ_i – сферические координаты i -ой грани, соответственно, долгота и полярное расстояние.

Математическое выражение F -функции в общей форме получим на основе формулы Минковского для объёма выпуклого полиэдра с числом сторон k [1]:

$$V = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^k n_i S_i \quad 1$$

Представим элементы, входящие в (1), в виде функций линейных и угловых переменных полиэдра:

$$n_i = c \lambda(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i) \quad 2$$

$$S_t = \sum_{i=1}^{t=4, \dots} S_i = c^2 \sum_{i=1}^{t=4, \dots} \psi(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i) \quad 3$$

Подставив (2) и (3) в (1), получим выражение для объёма кристалла:

$$V = c^3 \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{t=4, \dots} \lambda(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i) \psi(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i) \quad 4$$

Заменив в (4) произведение двух функций одной и приравняв объём к 1, определим c :

$$c = \sqrt[3]{\frac{3}{\sum_{i=1}^{t=4,\dots} g(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i)}} \quad 5$$

Параметр c является функцией приведения объёма кристалла к 1 при изменениях его формы. Подставив (5) в (3), получим F -функцию приведённой поверхности:

$$F(x, y, \dots, \varphi, \rho) = \left[\sqrt[3]{\frac{3}{\sum_{i=1}^{t=4,\dots} g(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i)}} \right]^2 \sum_{i=1}^{t=4,\dots} \psi(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i) \quad 6$$

Несмотря на геометрическую подоплёку, выражение (6) имеет физическое содержание. Если учесть, что первый множитель в (6) имеет порядок числа молекул на единицу площади поверхности раздела твёрдое – жидкость, то естественно предположить, что F -функция определяет порядок числа молекул на поверхности раздела твёрдое – жидкость для кристалла единичного объёма. Для теоретического анализа и практического использования важны графики F -функции. Для замкнутых постоянных ПФ она принимает одно численное значение. Для замкнутых переменных ПФ график F -функции представляет кривую, отражающую зависимость приведённой поверхности кристалла от его переменного параметра. Все возможные способы графического отображения F -функции кристаллов, образованных двумя, тремя и более ПФ, будут рассмотрены в последующих статьях автора.

F -функция дифференцируемая на интервалах изменения аргументов. Используя приёмы дифференциального исчисления, можно находить характеристические точки кривых: минимума, изменения направления вогнутости. Это позволяет для комбинации нескольких ПФ находить параметры кристалла, обладающего минимальной приведённой поверхностью, а также устанавливать границы интервалов существования определенных габитусов. С целью расширения границ использования предлагается двумерный вариант F -функции, который обозначим F_2 -функция и определим так: **F_2 -функция, или приведённый периметр кристалла – это периметр его сечения плоскостью, параллельной выбранному кристаллографическому направлению, площадь которого равна 1.**

Математическое выражение F_2 -функции для сечения в виде многоугольника с числом сторон k получим в общей форме, следуя приёму, использованному выше для вывода формулы приведённой поверхности:

$$S = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k n_i l_i \quad 7$$

где n_i – нормаль к i -ой стороне, l_i – длина i -ой стороны сечения кристалла. Представим элементы в (7) в виде функции линейной x_i и угловой α_i переменных:

$$n_i = c \lambda(x_i, \alpha_i) \quad 8$$

$$P = \sum_{i=1}^k l_i = \sum_{i=1}^k c \psi(x_i, \alpha_i) \quad 9$$

Подставив (8) и (9) в (7), получим выражение для площади выбранного сечения кристалла:

$$S = c^2 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \lambda(x_i, \alpha_i) \psi(x_i, \alpha_i) \quad 10$$

Заменим произведение двух функций в (10) одной, приравняем площадь сечения к 1 и определим выражение для параметра c :

$$c = \sqrt{\frac{2}{\sum_{i=1}^k \vartheta(x_i, \alpha_i)}} \quad 11$$

Подставив (11) в (9), получим в общем виде формулу F_2 -функции:

$$F_2(x, \alpha) = \sqrt{\frac{2}{\sum_{i=1}^k \vartheta(x_i, \alpha_i)}} \sum_{i=1}^k \psi(x_i, \alpha_i) \quad 12$$

F_2 -функция может быть полезной при изучении горных пород и руд в шлифах для решения петрологических задач. Графики F -функции для комбинаций ПФ будем называть кристалло-морфологическими. Когда на них будут наноситься точки, отвечающие кристаллам конкретных минералов с целью получения минерагенических результатов, графики будут называться кристалло-минерагеническими. Кристалло-морфологические графики предлагаются как инструмент минерагенических исследований.

Для примера рассчитаем F -функции кристаллов кубической сингонии в декартовой системе координат: $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Здесь все ПФ закрытые, среди них есть постоянные и переменные. Постоянные ПФ: тетраэдр, куб, октаэдр, ромбододекаэдр. Возможные комбинации ПФ в пяти классах симметрии даны в табл. 1 [4].

Таблица 1. Классы симметрии и ПФ кубической сингонии.

Символ	Классы и ПФ				
	23	m3	-43m	432	m3m
{hkl}	пентагонтри-тетраэдр	дидодекаэдр	гексатетраэдр	пентагонтриоктаэдр	гексоктаэдр
{hhl} (h>l)	тетрагон-тритетраэдр {211}	тригонтриок-таэдр {211}	тетрагонтрите-траэдр	тригонтриоктаэдр	
{hhl} (h<l)	тригонтрите-траэдр {122}	тетрагонтри-октаэдр {122}	тригонтрите-траэдр	тетрагонтриоктаэдр	
{hk0}	пентагондодекаэдр		тетрагексаэдр		
{111}	тетраэдр	октаэдр	тетраэдр	октаэдр	
{110}	ромбододекаэдр				
{100}	куб				

Из таблицы видно, что куб и ромбододекаэдр общие для всех классов симметрии. Тетраэдр и октаэдр с производными разделились между двумя тетраэдрическими и двумя октаэдрическими классами. Расчёт F -функции проведём так. Сначала рассчитаем F -функции постоянных форм, затем их переменных производных, наконец, комбинаций ПФ, возможных в том или ином классе симметрии. В этой статье ограничимся рассмотрением постоянных форм. Переменные формы и комбинации форм рассмотрим в следующих статьях. Приведенная поверхность постоянных форм есть величина постоянная, т.е. выражается для каждой формы одним числом.

Тетраэдр. Поверхность и объём тетраэдра с длиной ребра c , принимаемой за параметр приведения, равны [3]:

$$S = 1.732 c^2 \quad 13$$

$$V = 0.1179 c^3 \quad 14$$

Определив из (14) значение c для условия $V = 1$ и подставив вместе с (13) в (6), рассчитаем F -функцию. Здесь и далее приведённую поверхность определяем до второго знака после запятой.

$$F = 1.7321 (0.1179)^{-2/3} = 7.20$$

Куб. Приведённая поверхность с очевидностью равна 6.00. Проведя те же математические операции, что для тетраэдра, рассчитаем F -функцию для октаэдра, ромбододекаэдра, пентагондодекаэдра {210} и шара. **Октаэдр:** $S = 3.4641 c^2$, $V = 0.4714 c^3$, $F = 3.4641 (0.4714)^{-2/3} = 5.72$. **Ромбододекаэдр:** $S = 11.314 c^2$, $V = 3.079 c^3$, $F = 11.314 (3.079)^{-2/3} = 5.35$. **Пентагондодекаэдр.** $S = 20.6457 c^2$, $V = 7.6631 c^3$, $F = 20.6457 (7.6631)^{-2/3} = 5.31$. **Шар:** $S = 12.57 c^2$, $V = 4.189 c^3$, $F = 12.57 (4.189)^{-2/3} = 4.84$. Постоянные ПФ кубической сингонии образуют ряд по убыванию приведенной поверхности (табл. 2).

Таблица 2. Ряд ПФ кубической сингонии по убыванию приведённой поверхности.

ПФ	тетраэдр	куб	октаэдр	ромбо- и пентагондодекаэдр	шар
F	7.20	6.00	5.72	5.35 и 5.31	4.84
$(F_i - F_s) / F_s$	0.49	0.24	0.18	0.10	0
число граней	4	6	8	12	∞

Примечание: F_s – F-функция шара.

Ряд демонстрирует, как приведённая поверхность ПФ уменьшается с ростом числа граней, асимптотически приближаясь к приведённой поверхности шара. Эта тенденция соответствует теореме Линделёфа, согласно которой среди всех выпуклых полиэдров с данными направлениями граней и объёмом наименьшую площадь поверхности имеет полиэдр, описанный вокруг шара [1]. Приведённая поверхность шара 4.84 ограничивает снизу значения приведённых поверхностей для кристаллов любых форм.

Список литературы

1. Александров А.Д. Выпуклые многогранники. М.-Л.: Наука, 1950. 330 с.
2. Бакли Г. Рост кристаллов. М.: Изд-во иностр. лит., 1954. 406 с.
3. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Физматгиз, 1964. 171 с.
4. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1976. 302 с.

Статья 2. РАСЧЕТ F-ФУНКЦИИ ПЕРЕМЕННЫХ ФОРМ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Предлагаются два вывода F-функции переменных и комбинационных форм кристаллов: геометрический и аналитический. Геометрический метод основан на представлении F- функции в виде выражения [1]:

$$F(x, y, \dots, \varphi, \rho) = \left[\sqrt[3]{\frac{3}{\sum_{i=1}^{t=4} \vartheta(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i)}} \right]^2 \sum_{i=1}^{t=4} \psi(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i), \quad 1$$

где $(x_i, y_i, \dots, \varphi_i, \rho_i)$ – линейные и угловые параметры кристалла. При этом площадь поверхности и объём кристалла легко определяются по одному параметру для двойных и двум – для тройных комбинационных систем. Геометрический метод рекомендуется для нахождения F-функции относительно

простых форм. Для сложных систем предлагается упрощённый аналитический метод решения. Аналитический метод основан на параболическом характере выражения (1), позволяющем представить его в виде квадратного уравнения с одной переменной x :

$$F(x) = ax^2 + bx + c \quad 2$$

В качестве переменной в (2) может быть угловой параметр (например, граничный угол) или относительная доля простой формы в огранении кристалла. График $F(x)$ представляет собой часть параболы на интервале значений x , заданном членами гомологического ряда переменных форм или составными членами комбинационных форм. Для определения постоянных a , b , c в (2) решим систему уравнений:

$$\begin{cases} ax_1^2 + bx_1 + c = F_1(x) \\ ax_2^2 + bx_2 + c = F_2(x) \\ ax_3^2 + bx_3 + c = F_3(x) \end{cases} \quad 3$$

Два из них заданы конечными членами гомологического ряда переменных форм или составными членами комбинационных форм. Третье получим, используя координаты экстремальной точки для (1) параболы (2). Если по каким-либо данным известна координата x минимума функции (2), то в качестве третьего уравнения в (3) можно использовать уравнение производной по (2). Но чаще встречаются случаи, когда координаты минимума неизвестны. Тогда минимальное значение F -функции можно приближённо определить из её ранее установленной зависимости от числа граней n на кристалле:

$$F(n) = 4.84 + \frac{f}{n} + \frac{g}{n^2} + \frac{h}{n^3} \quad 4$$

График функции (4) с учётом её кристаллографического содержания представляет часть положительной ветви гиперболы, определённой на интервале изменений аргумента, принимающего целочисленные чётные значения: а) для семейства тетраэдрических классов симметрии кристаллов $4 \leq n < \infty$; б) для семейства октаэдрических классов симметрии кристаллов $6 \leq n < \infty$. Горизонтальная асимптота гиперболы по определению равна F -функции шара (4.84) как предельной форме кристаллов кубической сингонии при бесконечном увеличении числа граней:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F(n) = 4.84 \quad 5$$

Вертикальная асимптота гиперболы не имеет кристаллографического содержания, поскольку функция (4) ограничена слева её максимальными значениями 7.2 для тетраэдра и 6 для куба.

Для определения констант в (4) решим для каждого семейства систему трёх уравнений. Используем для этого известные значения F-функций постоянных простых форм: для октаэдрического семейства – куб: $F(6) = 6$, октаэдр: $F(8) = 5.72$, ромбододекаэдр $F(12) = 5.35$; для тетраэдрического семейства – тетраэдр: $F(4) = 7.2$, комбинация положительного и отрицательного тетраэдров: $F(8) = 5.72$. Подставив данные в (4), получим системы уравнений: а) для октаэдрического семейства

$$\begin{cases} 6.00 = 4.84 + \frac{f}{6} + \frac{g}{6^2} + \frac{h}{6^3} \\ 5.72 = 4.84 + \frac{f}{8} + \frac{g}{8^2} + \frac{h}{8^3} \\ 5.35 = 4.84 + \frac{f}{12} + \frac{g}{12^2} + \frac{h}{12^3} \end{cases} \quad 6$$

а) для тетраэдрического семейства:

$$\begin{cases} 7.20 = 4.84 + \frac{f}{4} + \frac{g}{4^2} + \frac{h}{4^3} \\ 6.00 = 4.84 + \frac{f}{6} + \frac{g}{6^2} + \frac{h}{6^3} \\ 5.72 = 4.84 + \frac{f}{8} + \frac{g}{8^2} + \frac{h}{8^3} \end{cases} \quad 7$$

Найдя константы f, g, h из (6) и (7) и подставив их в (4), получим формулы для вычисления F-функции: а) для октаэдрического семейства

$$F(n) = 4.84 + \frac{1.28}{n} + \frac{82.08}{n^2} - \frac{288}{n^3} \quad 8$$

б) для тетраэдрического семейства

$$F(n) = 4.84 + \frac{12.56}{n} - \frac{75.84}{n^2} + \frac{253.44}{n^3} \quad 9$$

Графики (8) и (9) даны на рис. 1. При равенстве числа граней, величина F-функции для кристаллов тетраэдрического семейства несколько выше, чем для октаэдрического.

Выражения (8) и (9) применимы к постоянным, переменным и комбинационным формам. В последних двух случаях они характеризуют форму кристаллов, обладающую минимальным значением приведённой поверхности. Это свойство выражений (8) и (9) имеет большое значение для вывода F-функций для сложных переменных и комбинационных форм кристаллов. В результате определения минимального значения приведённой поверхности $F_{\min}(x)$ полиэдра третье уравнение в системе (3) может быть представлено выражением:

$$c - b^2/4a = F_{\min}(x) \quad 10$$

Система (3) примет вид:

$$\begin{cases} ax_1^2 + bx_1 + c = F_1(x) \\ ax_2^2 + bx_2 + c = F_2(x) \\ c - \frac{b^2}{4a} = F_{\min}(x) \end{cases} \quad 11$$

Решив её, находим константы a , b , c и подставив их в (2), получим формулу для вычисления F -функции переменных и комбинационных форм кристаллов кубической сингонии.

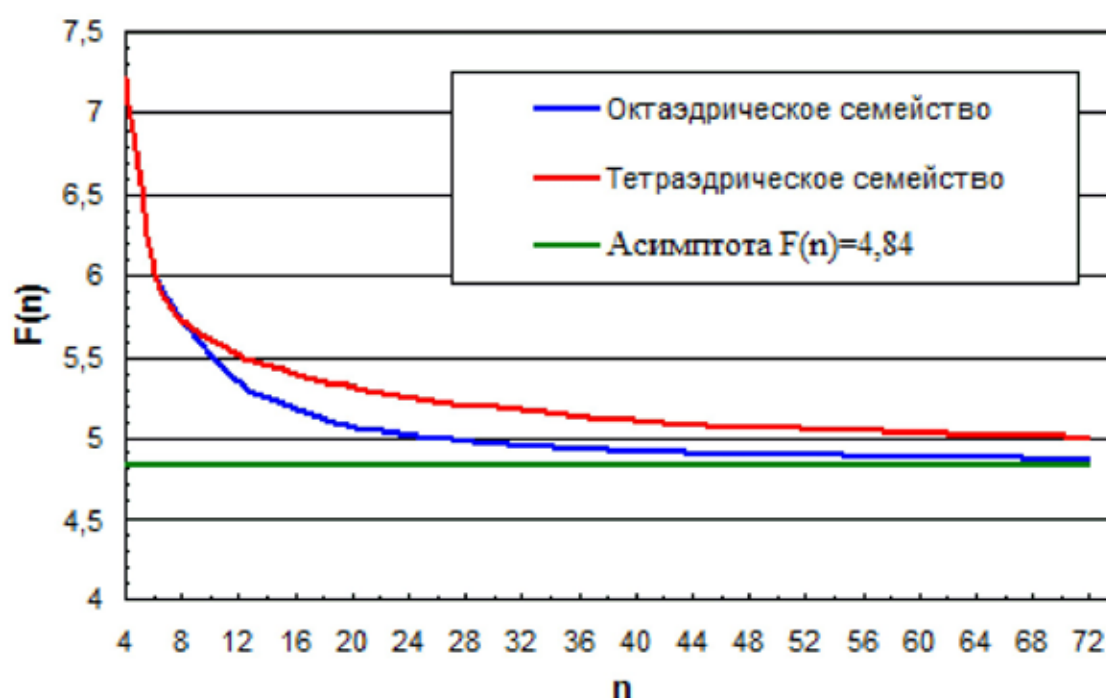


Рис. 1. Изменение F -функции с ростом числа граней на кристаллах кубической сингонии.

Вывод F -функции переменных форм

Переменные формы в кубической сингонии являются производными от базовых постоянных форм: гексаэдра (куба), тетраэдра и октаэдра. Поэтому выделяются гомологические ряды переменных форм: гексаэдрические, тетраэдрические и октаэдрические. Ряды начинаются базовой формой и завершаются постоянной или переменной формой, совместимой с базовой в данном классе симметрии.

Гексаэдрические гомологические ряды переменных форм

На базе гексаэдра образуются два несовместных гомологических ряда простых переменных форм: куб $\{100\}$ – тетрагексаэдр $\{hk0\}$ – ромбододе-

каэдр $\{110\}$; куб $\{100\}$ – пентагондодекаэдр $\{hk0\}$ – ромбододекаэдр $\{110\}$. Первый ряд реализуется в классах $-43m$, 432 , $m3m$, второй – в 23 и $m3$.

Гомологический ряд куб – тетрагексаэдр – ромбододекаэдр

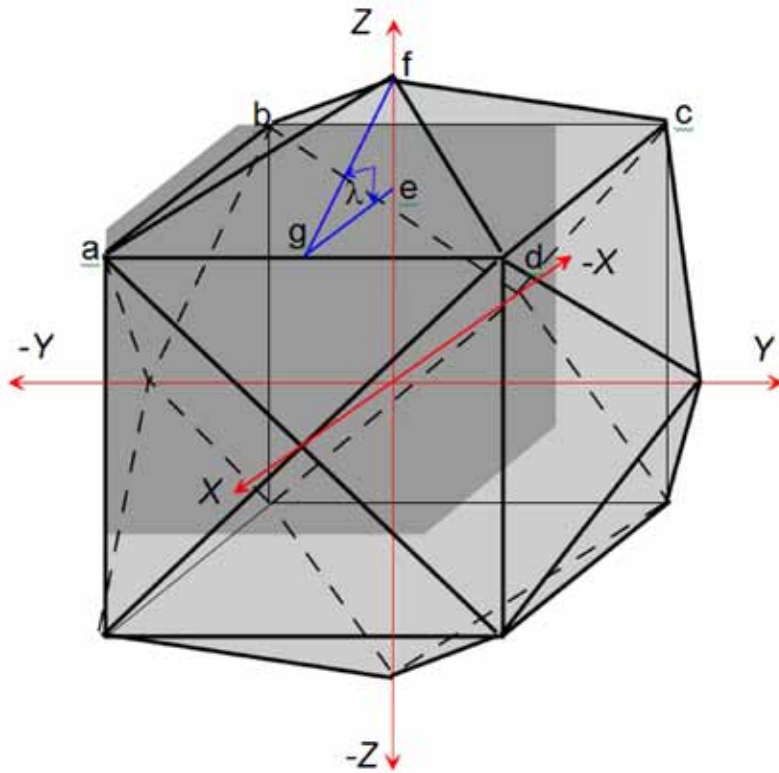


Рис. 2. Тетрагексаэдр.

Тетрагексаэдр получается надстраиванием на гранях куба тетрагональных пирамид (рис. 2). Для вывода F-функции тетрагексаэдра воспользуемся геометрическим методом. Угол наклона граней пирамид к граням куба обозначим λ . В качестве параметра приведения выберем на рис. 2 длину ребра куба $ad = c$. Полная поверхность полиэдра при этом равна суммарной боковой поверхности тетрагональных пирамид.

$$S_t = 6 \frac{(d)^2}{\cos \lambda} = c^2 \frac{6}{\cos \lambda} \quad 12$$

Объём тетрагексаэдра равен сумме объёмов куба и тетрагональных пирамид.

$$V = c^3 + 6 \frac{1}{3} c^2 \frac{c}{2} \operatorname{tg} \lambda = c^3 (1 + \operatorname{tg} \lambda) \quad 13$$

Определив из (13) параметр приведения c для условия $V = 1$ и подставив его в (12), получим значение F-функции для тетрагексаэдра.

$$F = (1 + \operatorname{tg} \rho)^{-\frac{2}{3}} \frac{6}{\cos \lambda} \quad 14$$

Интервал изменения угла наклона граней тетрагексаэдра к грани куба: $0 < \lambda < 45^\circ$. При $\lambda = 45^\circ$ тетрагексаэдр вырождается в ромбододекаэдр, замыкающий гомологический ряд, при $\lambda = 0^\circ$ – в базовую форму – куб.

График (14) на рис. 3 имеет чёткий глубокий минимум, соответствующий формам $\{210\}$ и $\{530\}$. Тетрагексаэдры не образуют габитусных форм, но в качестве второстепенных встречаются на кристаллах указанных классов симметрии. При этом статистически наиболее часто встречаются формы,

характеризующиеся минимальными значениями F-функции: {210}, {310} и {320} (рис. 3). Можно предположить, что в некоторых случаях тетрагексаэдры являются не формами роста, а формами растворения. Для примера можно привести указание на неясно выраженные грани тетрагексаэдра на подвергшихся растворению округлых алмазах [4].

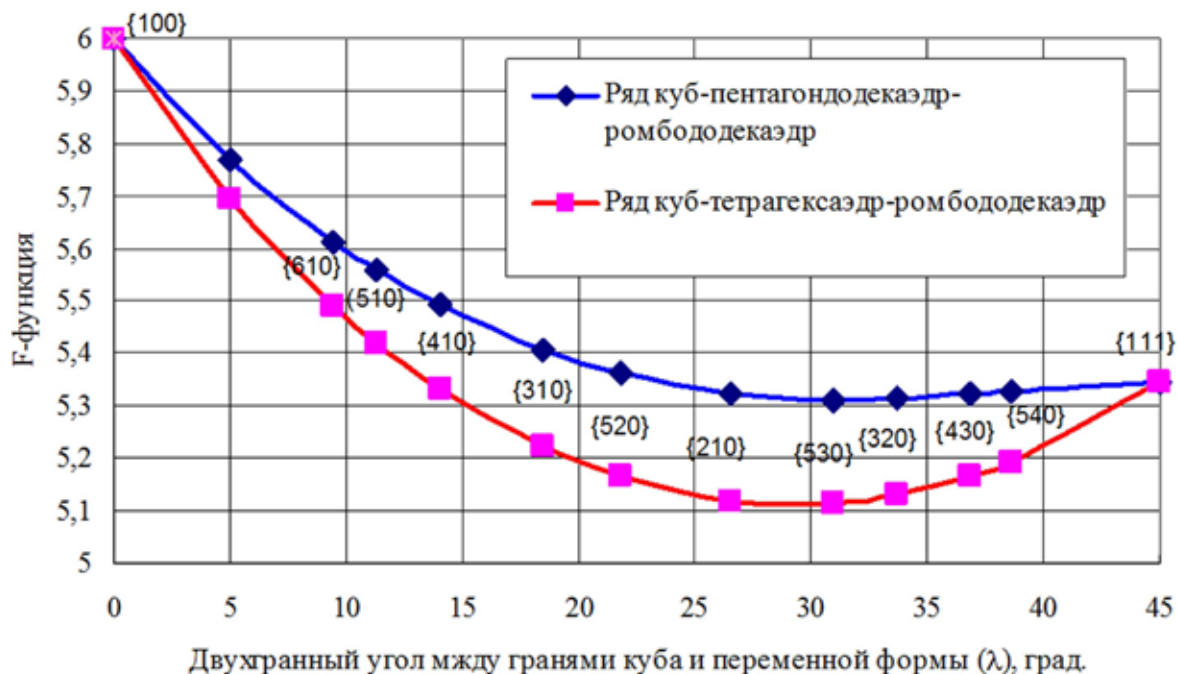


Рис. 3. Изменение F-функции в гомологических рядах переменных форм кристаллов на базе куба.

Гомологический ряд куб – пентагондодекаэдр – ромбододекаэдр

Если двугранный угол между трапецией и гранью куба обозначить λ , то угол между треугольником и гранью куба равен $90 - \lambda$. Формулу, описывающую изменение формы кристаллов в рассматриваемом гомологическом ряду, найдём геометрическим способом в виде функции угла λ . На рис. 4 дана проекция «крыши» пентагондодекаэдра на грань куба. В качестве параметра приведения примем ребро куба: $ab = c$, тогда расчётные элементы клина и его проекции будут равны: высота клина –

$$h = c \frac{\operatorname{tg} \lambda}{2}; \quad ge = h \cdot \operatorname{ctg}(90 - \lambda) = c \frac{\operatorname{tg}^2 \lambda}{2}; \quad ef = c(1 - \operatorname{tg}^2 \lambda)$$

Площади проекций боковых граней клина на грань куба:

$$S_{aefd}^0 = \frac{ad + ef}{2} \cdot \frac{ab}{2} = \frac{c^2}{4} + \frac{c^2}{4}(1 - \operatorname{tg}^2 \lambda) = \frac{c^2}{4}(2 - \operatorname{tg}^2 \lambda)$$

$$S_{abe}^0 = \frac{ab \cdot ge}{2} = \frac{c^2}{4} \operatorname{tg}^2 \lambda$$

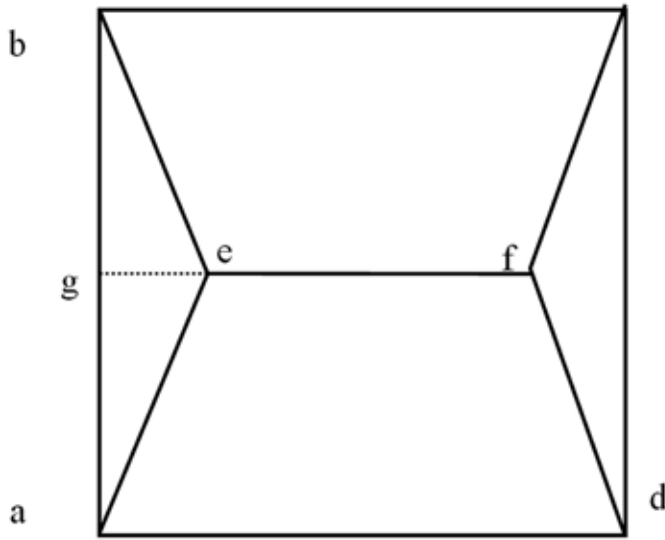


Рис. 4. Проекция граней пентагондодекаэдра на грань куба.

Полная поверхность и объём пентагондодекаэдра:

$$S = 12 \left(\frac{S_{aefd}^0}{\cos \lambda} + \frac{S_{abe}^0}{\cos(90 - \lambda)} \right) = 3c^2 \left(\frac{2 - \operatorname{tg}^2 \lambda}{\cos \lambda} + \frac{\operatorname{tg}^2 \lambda}{\sin \lambda} \right) \quad 15$$

$$V = (ab)^3 + 6 \cdot \frac{1}{6} ab \cdot h \cdot (2ab + ef) = c^3 \left[1 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{2} (3 - \operatorname{tg}^2 \lambda) \right] \quad 16$$

Определив из (16) для условия $V = 1$ параметр c и подставив его в (15), получим формулу для F-функции в рассматриваемом гомологическом ряду:

$$F = 3 \left[1 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{2} (3 - \operatorname{tg}^2 \lambda) \right]^{-\frac{2}{3}} \left(\frac{2 - \operatorname{tg}^2 \lambda}{\cos \lambda} + \frac{\sin \lambda}{\cos^2 \lambda} \right) \quad 17$$

График функции (17) на рис. 3 характеризуется неглубоким минимумом, образованным формами $\{210\}$, $\{530\}$, $\{320\}$. На природных кристаллах (пирит, кобальтин) в качестве габитусной формы встречается только положительный пентагондодекаэдр $\{210\}$, грани с более сложными индексами отмечены как второстепенные.

Тетраэдрические гомологические ряды переменных форм

На базе тетраэдра образуются четыре гомологических ряда простых переменных форм: тетраэдр $\{111\}$ – тригонритетраэдр $\{hhl\}$, $h < 1$ – куб $\{001\}$; тетраэдр $\{111\}$ – тетрагонритетраэдр $\{hhl\}$, $h > 1$ – ромбододекаэдр $\{110\}$; тетраэдр $\{111\}$ – пентагонритетраэдр $\{hkl\}$ – пентагондодекаэдр $\{210\}$; тетраэдр $\{111\}$ – гексатетраэдр $\{hkl\}$ – тетрагексаэдр $\{210\}$. Первые два ряда реализуются в обоих тетраэдрических классах симметрии 23 , $-43m$, третий – в классе 23 , четвёртый в $-43m$. Ниже рассмотрим каждый ряд в отдельности.

Гомологический ряд тетраэдр – тригонритетраэдр – куб

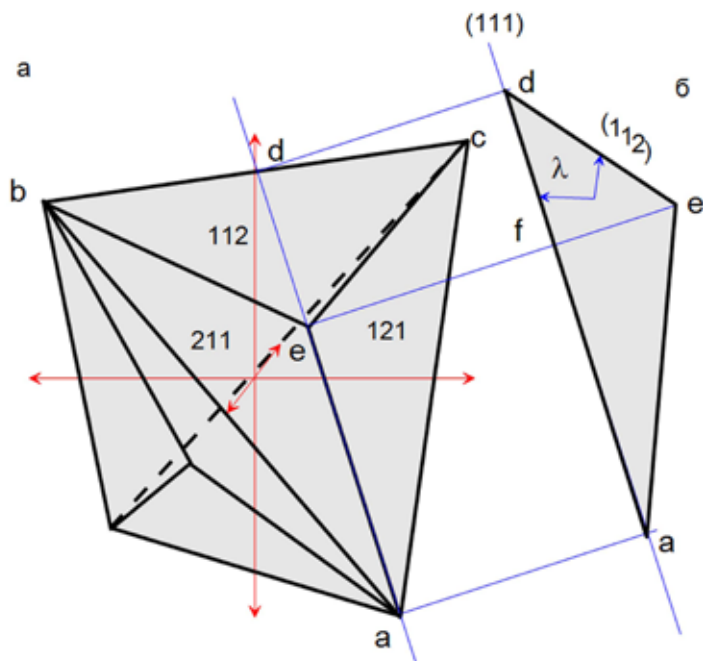


Рис. 5. Тригонритетраэдр (а) и разрез через «надстраиваемую» пирамиду (б).

Тригонритетраэдр получается «надстраиванием» на гранях тетраэдра тригональной пирамиды (рис. 5). Приведённую поверхность такой формы выразим как функцию угла наклона граней пирамиды к грани тетраэдра λ .

Для вывода формулы приведённой поверхности тригонритетраэдра в качестве параметра приведения выберем длину ребра базового тетраэдра $ab = c$. Далее определим полную поверхность и объём кристалла, как функцию

угла λ . Полная поверхность тригонритетраэдра равна сумме площадей поверхности четырех надстраиваемых пирамид:

$$S_t = 4 \frac{S_{\Delta abc}}{\cos \lambda} = 4 \frac{\sqrt{3} (ab)^2}{4 \cos \lambda} = c^2 \frac{\sqrt{3}}{\cos \lambda} \quad 18$$

Определив объём надстраиваемых пирамид V_p и прибавив его к объёму тетраэдра $V_{\{111\}}$, получим выражение для объёма тригонритетраэдра V_t :

$$V_p = 4 \frac{1}{3} S_{\Delta abc} f e = \frac{4}{3} S_{\Delta abc} (df) \operatorname{tg} \lambda = \frac{4}{3} S_{\Delta abc} \frac{1}{3} (ad) \operatorname{tg} \lambda = \frac{4}{9} \frac{\sqrt{3}}{4} c^2 \frac{\sqrt{3}}{2} c \cdot \operatorname{tg} \lambda = c^3 \frac{\operatorname{tg} \lambda}{6} \quad 19$$

$$V_t = V_{\{111\}} + V_p = c^3 \left(0.1179 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{6} \right)$$

Из (19) определим параметр приведения c для условия $V_t = 1$ и подставив его в (18), получим F-функцию для тригонритетраэдра:

$$F = \left(0.1179 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{6} \right)^{-\frac{2}{3}} \frac{\sqrt{3}}{\cos \lambda} \quad 20$$

График функции (20) на рис. 6 имеет минимум при $\lambda = 34.5^\circ$. При критическом угле $\lambda = 54^\circ 44'$, равном углу между гранями тетраэдра и куба, тригонритетраэдр вырождается в куб, замыкающий гомологический ряд. Наименьшей приведённой поверхностью в ряду обладает тригонритетра-

эдр $\{114\}$ с координатами $\lambda = 35.27$, $F = 5.56$. Вправо по графику от точки $\{114\}$ кристаллы приобретают псевдокубический облик, влево – псевдотетраэдрический, сохраняя тригонритетраэдрический габитус.

Из пяти классов симметрии кубической сингонии тригонритетраэдры возможны только в двух: 1) в классе $-43m$ с гексатетраэдром и тетрагексаэдром; 2) в классе 23 с пентагонритетраэдром и пентагондодекаэдром. В огранении природных кристаллов тригонритетраэдры встречаются редко в силу незначительной распространенности этой формы и по причине небольшого количества минералов, кристаллизующихся в данных классах симметрии. К гексатетраэдрическому классу симметрии $-43m$ относятся сульфиды: тетраэдрит $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$, теннантит $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$, сфалерит ZnS ; галогиды Cu: нантокид CuCl , маршит CuJ . В классе 23 кристаллизуются сложные сульфиды Co и Ni: кобальтин CoAsS , герсдорфит NiAsS , ульманит NiSbS .

Известен случай, когда тригонритетраэдр $\{112\}$ является единственной простой формой в огранении кристаллов неизвестного минерала, предположительно гельвина [2, 3]. Псевдоморфозы по этому минералу в форме идеальных тригонритетраэдров, получившие название ахтарандитов, встречаются по р. Ахтаранде, притоку Вилюя, Вост. Сибирь. В качестве подчиненной габитусной формы тригонритетраэдр $\{211\}$ в комбинации с положительным тетраэдром $\{111\}$ встречается в огранении тетраэдрита, теннантита, метацинабарита HgS [4]. Формы $\{322\}$ и $\{311\}$ описаны в качестве габитусных на кристаллах маршита CuJ [5]. Встречающиеся в огранении кристаллов обоих классов симметрии второстепенные формы тригонритетраэдров с более сложными индексами на рис. 5 располагаются вблизи минимума F -функции (отмечены синими треугольными маркерами). Тригонритетраэдры, встречающиеся в огранении минералов в качестве габитусных форм, помечены синими квадратными маркерами.

Гомологический ряд тетраэдр – тетрагонритетраэдр – ромбододекаэдр

Тетрагонритетраэдр получается «надстраиванием» на гранях тетраэдра неправильных клиновидных тригональных пирамид. Ввиду сложности геометрического вывода формулы приведённой поверхности этой переменной формы представим её в виде квадратичной функции угла наклона граней пирамиды к грани тетраэдра λ :

$$F(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c \quad 21$$

График $F(\lambda)$ представляет собой часть параболы на интервале λ , заданном конечными членами гомологического ряда $0 \leq \lambda \leq 35^\circ 16'$. Для определения постоянных a , b , c в систему уравнений (3) подставим координаты конечных членов гомологического ряда: тетраэдра $\lambda = 0$, $F(\lambda) = 7.2$ и ромбододекаэдра $\lambda = 35.27^\circ$, $F(\lambda) = 5.35$, и определим координаты какой-либо третьей точки. Третье уравнение может быть составлено на основе свойства рассматриваемого гомологического ряда: число граней переменной формы

(12) не превышает число граней конечной формы ряда – ромбододекаэдра и, следовательно, минимальное значение 5.35 F-функция принимает в данном ряду при $\lambda = 35.27^\circ$. Отсюда следует, что производная от (21) в этой точке равна 0. Составим систему уравнений:

$$\begin{aligned} c &= 7.2 \text{ при } \lambda = 0 \\ 35.27^2 a + 35.27b + c &= 5.35 \text{ при } \lambda = 35.27 \\ 2a \cdot 35.27 + b &= 0 \text{ при } \lambda = 35.27 \end{aligned} \quad 22$$

Решение системы (22) даёт: $a = 0.00149$, $b = -0.1049$, $c = 7.2$. Подставив их в (21), получим выражение F-функции для рассматриваемого гомологического ряда:

$$F(\lambda) = 0.00149 \lambda^2 - 0.1049 \lambda + 7.2 \quad 23$$

Простые формы тетрагонритетраэдра возможны в тех же классах симметрии $-43m$ и 23 , в тех же сочетаниях с другими простыми формами, что и тригонритетраэдры. В ограничении природных кристаллов тетрагонритетраэдры встречаются ещё реже, чем тригонритетраэдры. Не известны случаи, чтобы тетрагонритетраэдр в качестве габитусной формы участвовал в ограничении кристаллов какого-либо минерального вида. Обычно встречающиеся на кристаллах минералов в качестве второстепенных форм тетрагон-

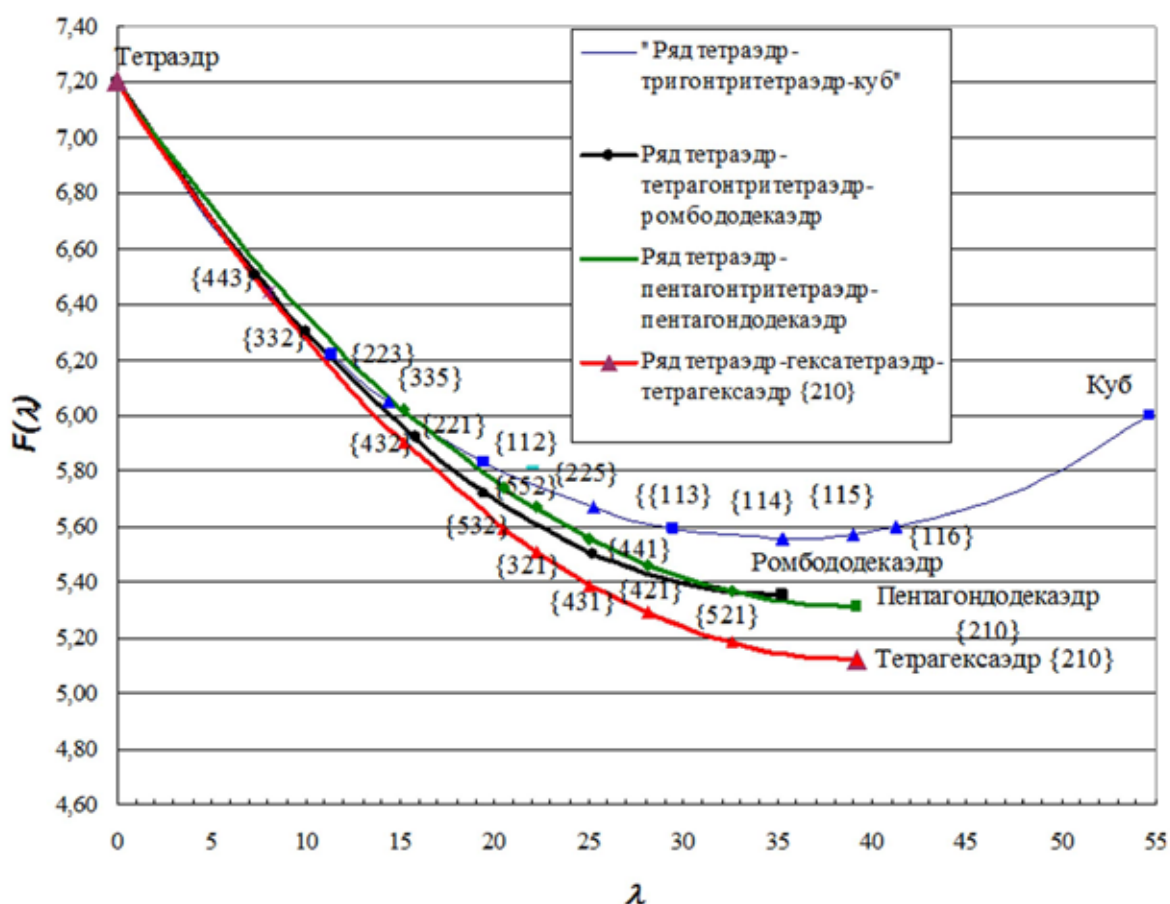


Рис. 6. Изменение F-функции переменных форм кристаллов в гомологических рядах тетраэдрического семейства кубической сингонии.

тритетраэдр имеют относительно простые индексы. На графике F-функции они отмечены чёрными круглыми маркерами (рис. 6). При критическом угле $\lambda = 35^\circ 16'$ тетрагонтритетраэдр вырождается в ромбододекаэдр, замыкающий гомологический ряд.

Гомологический ряд тетраэдр – пентагонтритетраэдр – пентагондодекаэдр

Пентагонтритетраэдр получается «надстраиванием» над гранями тетраэдра «крыши» из неправильных пятиугольников. Выражение приведённой поверхности для этой переменной формы находим в виде функции угла λ наклона граней пентагонтритетраэдра к грани тетраэдра, определённой на интервале, заданном конечными членами гомологического ряда $0 \leq \lambda \leq 39^\circ 14'$. В качестве координат опорных точек выбираем координаты форм, замыкающих гомологический ряд, и координаты минимума функции на заданном интервале изменения переменной: 1 ($\lambda = 0$, $F = 7.2$), 2 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $F = 5.31$), 3 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $dF/d\lambda = 0$). Подставив в (3) поочередно координаты опорных точек, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} c = 7.2 \\ 39.23^2 a + 39.23b + c = 5.31 \\ 2 \cdot 39.23a + 39.23 = 0 \end{cases} \quad 24$$

Из (24) находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим уравнение, описывающее изменение F-функции в гомологическом ряду:

$$F(\lambda) = 0.001227 \lambda^2 - 0.096 \lambda + 7.2 \quad 25$$

График (25) дан на рис. 6 с графиками других гомологических рядов тетраэдрического семейства. Поскольку тетрагонтритетраэдрический и пентагонтритетраэдрический гомологические ряды заканчиваются подобными по числу граней формами с почти равными значениями F-функций ($F_{\{110\}} = 5.35$, $F_{\{210\}} = 5.31$), графики обоих рядов почти совпадают. Простые формы пентагонтритетраэдра теоретически возможны только в классе симметрии 23. На графике зелёными маркерами вынесены формы $\{321\}$ и $\{432\}$, редко встречающиеся на кристаллах кобальтина и ульманита. При критическом угле $\lambda = 39^\circ 14'$ пентагонтритетраэдр вырождается в пентагондодекаэдр, замыкающий гомологический ряд.

Гомологический ряд тетраэдр – гексатетраэдр – тетрагексаэдр $\{210\}$

Гексатетраэдр получается из тригонтритетраэдра поднятием на некоторую высоту над ребром тетраэдра биссектрисы, проведённой к нему из вершины тригонтритетраэдра. Грань последнего, представляющая равнобедренный треугольник, при этом переламывается на две равные грани, каж-

дая из которых представляет неравносторонний треугольник. Приведённую поверхность гексатетраэдра выразим приближенной функцией угла λ между его гранью и гранью тетраэдра, как это было сделано в предыдущих разделах. В качестве координат опорных точек выбираем: 1 ($\lambda = 0$, $F = 7.2$), 2 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $F = 5.12$), 3 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $dF/d\lambda = 0$). Подставив в (3) поочередно координаты опорных точек, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} c = 7.2 \\ 39.23^2 a + 39.23b + c = 5.12 \\ 2 \cdot 39.23 a + b = 0 \end{cases} \quad 26$$

Из (26) находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим выражение для приведённой поверхности кристаллов в гомологическом ряду тетраэдр – гексатетраэдр – тетрагексаэдр.

$$F(\lambda) = 0.001352 \lambda^2 - 0.106059 \lambda + 7.2 \quad 27$$

График (27) на рис. 6 подобен двум предыдущим. Простые формы гексатетраэдра теоретически возможны в классе симметрии $-43m$. На графике красными маркерами вынесены формы, редко встречающиеся на кристаллах указанного класса симметрии. При критическом угле $\lambda = 39^\circ 14'$ гексатетраэдр вырождается в тетрагексаэдр $\{210\}$, замыкающий гомологический ряд.

Октаэдрические гомологические ряды переменных форм

На базе октаэдра образуются пять гомологических рядов простых форм: октаэдр $\{111\}$ – тригонтриоктаэдр $\{hhl\}$, $h > 1$ – ромбододекаэдр $\{110\}$; октаэдр $\{111\}$ – тетрагонтриоктаэдр $\{hhl\}$, $h < 1$ – куб $\{100\}$; октаэдр $\{111\}$ – пентагонтриоктаэдр $\{hkl\}$ – тетрагексаэдр $\{hk0\}$; октаэдр $\{111\}$ – дидододекаэдр $\{hkl\}$ – пентагондододекаэдр $\{hk0\}$; октаэдр $\{111\}$ – гексоктаэдр $\{hkl\}$ – тетрагексаэдр $\{hk0\}$.

Гомологический ряд октаэдр – тригонтриоктаэдр – ромбододекаэдр

Тригонтриоктаэдр получается «надстраиванием» на гранях октаэдра правильной тригональной пирамиды. Приведённая поверхность такой формы выражается функцией угла наклона λ граней пирамиды к грани октаэдра. Формула приведённой поверхности тригонтриоктаэдра легко выводится из формулы для тригонритетраэдра (20). В последней объём тетраэдра заменяется объёмом октаэдра, а объём надстраиваемых пирамид и поверхность тригонритетраэдра увеличивается в два раза.

$$F = \left(0.4714 + \frac{\lg \lambda}{3} \right)^{-\frac{2}{3}} \frac{2\sqrt{3}}{\cos \lambda} \quad 28$$

ромбододекаэдр – тетрагонтриоктаэдр. Для рассматриваемого гомологического ряда этими точками будут: λ ($\lambda = 0$, $F = 5.72$), 2 ($\lambda = 54^\circ 44'$, $F = 6.00$), 3 ($\lambda = 19^\circ 28'$, $F = 5.1$). Подставив в (3) координаты опорных точек, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} c = 5.72 \\ 54.73^2 a + 54.73b + c = 6 \\ 19.47^2 a + 19.47b + c = 5.1 \end{cases} \quad 29$$

Из (29) находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим уравнение приведённой поверхности для данного гомологического ряда:

$$F(\lambda) = 0.001048 \lambda^2 - 0.0523 \lambda + 5.72 \quad 30$$

На график функции (30) вынесены точки часто встречающихся тетрагонтриоктаэдров (рис. 7).

Наименьшей приведённой поверхностью в этом ряду обладают формы: $\{211\}$, $\{522\}$, $\{311\}$, $\{411\}$, наиболее часто встречающиеся на кристаллах всех классов симметрии октаэдрического семейства. Тетрагонтриоктаэдр $\{211\}$ – частая габитусная форма на кристаллах со структурой граната, формы $\{211\}$, $\{311\}$, $\{322\}$ часты в огранении кристаллов машеландбергита Ag_2Hg_3 , аргентита Ag_2S , криолитионита $\text{Na}_3\text{Al}_2(\text{LiF}_4)_3$, эглестонита $\text{Hg}_6\text{Cl}_{4-2x}\text{O}_{1+x}$ [5].

Гомологический ряд октаэдр – пентагонтриоктаэдр – тетрагексаэдр $\{210\}$

Пентагонтриоктаэдр получается «надстраиванием» над гранями октаэдра «крыши» из неправильных пятиугольников, аналогично тому, как она надстраивалась над гранями тетраэдра. В виду особой сложности пентагонтриоктаэдра, выведем аналитическим способом формулу его F -функции, как это было сделано для других сложных переменных форм. Для этого зададимся координатами трёх точек кривой F -функции. Две из них заданы концами гомологического ряда. Координату третьей точки, характеризующей прогиб параболы, определим из выражения (8), дающего минимальное значение F -функции для полиэдров с равным числом граней. Из всех триоктаэдрических многогранников с числом граней 24 наименьшей приведённой поверхностью обладает пентагональный триоктаэдр ($F = 5.04$). Используя координаты реперных точек: 1 ($\lambda = 0$, $F = 5.72$), 2 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $F = 5.12$), 3 ($\lambda = -b/2a$, $F = c - b^2/4a = 5.04$), выразим искомую формулу в виде параболы функции (2).

Подставив в (2) координаты опорных точек, получим систему уравнений.

$$\begin{cases} c = 5.72 \\ 39.23^2 a + 39.23b + c = 5.12 \\ c - \frac{b^2}{4a} = 5.04 \end{cases} \quad 31$$

Решив (31), находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим уравнение приведённой поверхности кристаллов в гомологическом ряду октаэдр – пентагонтриоктаэдр – тетрагексаэдр $\{210\}$:

$$F(\lambda) = 0.0008 \lambda^2 - 0.0466 \lambda + 5.72 \quad 32$$

Пентагонтриоктаэдр теоретически возможен лишь в классе симметрии 43, слабо представленном в царстве минералов. Морфологически к нему относятся нашатырь NH_4Cl и куприт Cu_2O . По рентгеновским данным структура этих минералов соответствует голоэдрической симметрии. На кристаллах этих минералов описаны формы пентагонтриоктаэдра $\{321\}$, $\{621\}$, $\{542\}$, $\{764\}$, $\{876\}$, $\{986\}$. Пентагонтриоктаэдр $\{986\}$ в качестве габитусной формы описан на кристаллах куприта из Корнуэлла [6]. Все перечисленные формы, за исключением $\{321\}$, выводятся по правилу Гольдшмидта, если гомологический ряд справа замкнуть тетрагексаэдром $\{hk0\}$. На графике (32) на рис. 7 правая ветвь параболы должна распадаться на самостоятельные ветви, каждая из которых замыкалась бы соответствующим тетрагексаэдром $\{hk0\}$.

Гомологический ряд октаэдр $\{111\}$ – дидодекаэдр $\{hkl\}$ – пентагондодекаэдр $\{hk0\}$

Дидодекаэдр возможен в дидодекаэдрическом классе симметрии $m\bar{3}$. Эта форма получается путем удвоения каждой грани пентагондодекаэдра. Формулу для F -функции дидодекаэдра выведем аналитическим способом, как функцию двухгранного угла λ между гранями дидодекаэдра и октаэдра. Для этого зададимся координатами трёх точек кривой F -функции. Две из них заданы концами гомологического ряда. Координату третьей, характеризующей прогиб параболы, примем равной минимуму F -функции тетрагонтриоктаэдра (5.07), подобного дидодекаэдру по числу (24) и форме граней (тетрагон). Используя координаты реперных точек: 1 ($\lambda = 0$, $F = 5.72$), 2 ($\lambda = 39^\circ 14'$, $F = 5.31$), 3 ($\lambda = -b/2a$, $F = c - b^2/4a = 5.07$) – искомую формулу выразим в виде параболической функции (2). Подставив в (2) координаты опорных точек, получим систему уравнений:

$$\begin{cases} c = 5.72 \\ 39.23^2 a + 39.23b + c = 5.31 \\ c - \frac{b^2}{4a} = 5.07 \end{cases} \quad 33$$

Из (33) находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим уравнение приведённой поверхности кристаллов рассматриваемого гомологического ряда:

$$F(\lambda) = 0.001085 \lambda^2 - 0.053 \lambda + 5.72 \quad 34$$

График (34) на интервале её определения $0 \leq \lambda \leq 39.23$ почти совпадает с графиком F-функции в тетрагонтриоктаэдрическом гомологическом ряду (рис. 7). В качестве второстепенных форм дидодекаэдра участвуют в ограничении кристаллов пирита, кобальтина, спериллита, скуттерудита, биксбиита. В качестве габитусной формы редко встречается дидодекаэдр $\{321\}$, в частности, в ограничении кристаллов пирита.

Гомологический ряд октаэдр – гексоктаэдр – тетрагексаэдр $\{210\}$

Гексоктаэдр получается из тригонтриоктаэдра переламыванием каждой грани на две равные, каждая из которых представляет неравносторонний треугольник. По той же схеме, что и для других сложных переменных форм, выведем формулу приведённой поверхности гексоктаэдра как параболической функции (2) двугранного угла λ между гранями октаэдра и гексоктаэдра. Для нахождения трёх констант в (2) составим три уравнения. Два получаются путём использования концов гомологического ряда. Третье получается из свойства параболы, определяющего экстремальное (минимальное) значение F-функции. Её минимальное значение, принимаемое гексоктаэдром, найдем по формуле (8). Система уравнений примет вид:

$$\begin{cases} c = 5.72 \\ 39.23^2 a + 39.23b + c = 5.12 \\ c - \frac{b^2}{4a} = 4.90 \end{cases} \quad 35$$

Из (35) находим коэффициенты a , b , c и подставив их в (2), получим уравнение приведённой поверхности кристаллов в гомологическом ряду октаэдр – гексоктаэдр – тетрагексаэдр $\{210\}$:

$$F(\lambda) = 0.00123 \lambda^2 - 0.0635 \lambda + 5.72 \quad 36$$

На график (36), совмещённый на рис. 7 с графиками других переменных форм октаэдрического семейства, вынесены точки часто встречающихся простых форм рассматриваемого гомологического ряда и прямая $F = 4.84$ (приведённая поверхность шара). Минимальными значениями F-функции характеризуются гексоктаэдры $\{431\}$, $\{421\}$, $\{321\}$, $\{531\}$, вплотную приближаясь к приведённой поверхности шара. Гексооктаэдры являются обычной, хотя и второстепенной формой в ограничении минералов голоэдрического класса симметрии кубической сингонии. Их появление, как правило, приурочено к заключительной стадии минералообразующего процесса, характеризующегося низкими значениями пересыщения питающих растворов.

Список литературы

1. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Физматгиз, 1964. С. 83-86, 211-213.

2. Вертушков Г.Н., Авдонин В.Н. Таблицы для определения минералов по физическим и химическим свойствам. М.: Недра, 1980.
3. Кузнецова В.Г., Шафрановский И.И. Кристалломорфология ахтарандита // Генезис минеральных индивидов и агрегатов. М.: Наука, 1966.
4. Минералы. Справочник. Т. 1. Самородные элементы, интерметаллические соединения, карбиды, нитриды, фосфиды, арсениды, антимониды, висмутиды, сульфиды, селениды, теллуриды. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
5. Минералы. Справочник. Т. 2, вып. 1. Галогениды. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
6. Минералы. Справочник. Т. 2, вып. 2. Простые окислы. М.: Изд-во АН СССР, 1965.

Статья 3. РАСЧЕТ F-ФУНКЦИИ КОМБИНАЦИИ ДВУХ ПОСТОЯННЫХ ФОРМ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Пять классов симметрии кубической сингонии объединяют 15 теоретически возможных в данной сингонии ПФ. Четыре из них представлены постоянными (тетраэдр, куб, октаэдр, ромбододекаэдр) полиэдрами. Из 6 математически возможных двойных комбинаций постоянных форм, в силу несовместимости тетраэдра и октаэдра, возможны 5 комбинаций: куб-октаэдр; куб-ромбододекаэдр; октаэдр-ромбододекаэдр; куб-тетраэдр; тетраэдр-ромбододекаэдр. В кубической сингонии именно они наиболее часто определяют габитус кристаллов. F-функция кристаллов, образованных комбинацией двух постоянных форм, является функцией одной переменной. F-функции для части комбинаций постоянных форм найдём геометрическим способом. На их примере покажем применимость приближенного аналитического метода решения задачи. Для других комбинаций выведем приближенные формулы F-функции аналитическим методом.

Комбинация куб – октаэдр

Случай 1. Доминантное развитие граней куба, вершины которого срезаются гранями октаэдра (рис. 1а). Исходные данные: $ab = c$ – длина ребра куба; $bd = cx$ – часть ребра куба, срезаемая гранью октаэдра; $0 \leq x \leq 0.5$. Полная поверхность кристалла равна поверхности куба, уменьшенной на площади 24 равнобедренных прямоугольных треугольников с катетом cx , срезаемых гранями октаэдра, и увеличенной на площадь граней октаэдра, представляющих равносторонние треугольники со стороной $cx\sqrt{2}$

$$S_i = 6c^2 - 24 \frac{c^2 x^2}{2} + 8 \frac{\sqrt{3}}{4} 2c^2 x^2 = c^2 (6 - 5.072x^2) \quad 1$$

Объём равен объёму куба, уменьшенному на объём трёхгранных пирамид, срезаемых гранями октаэдра.

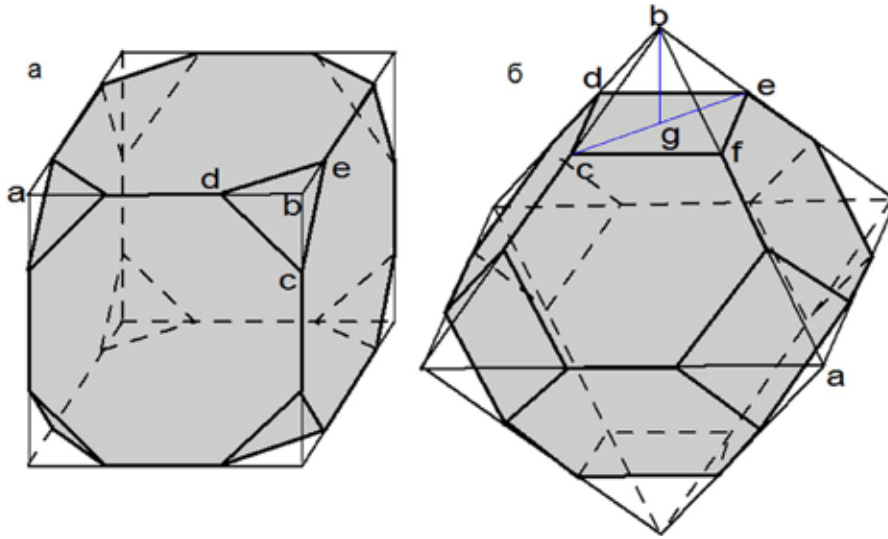


Рис. 1. Комбинация куба и октаэдра при доминантном развитии: а – куба; б – октаэдра.

$$V = c^3 - 8 \frac{1}{3} \frac{\sqrt{3}}{4} 2c^2 x^2 \frac{cx}{\sqrt{3}} = c^3 (1 - 1.333x^3) \quad 2$$

Определив из (2) параметр приведения c для условия $V = 1$ и подставив его в (1), получим формулу для вычисления F -функции исследуемой комбинации простых форм в случае доминантного развития куба:

$$F = (1 - 1.333x^3)^{\frac{2}{3}} (6 - 5.072x^2) \quad 3$$

справедливую при $0 \leq x \leq 0.5$. Доля суммарной площади граней октаэдра f_o в общей поверхности кристалла для любого значения x из указанного интервала определяется из (1):

$$f_o = \frac{4\sqrt{3}x^2}{6 - 5.072x^2} \quad 4$$

Случай 2. Доминантное развитие граней октаэдра, вершины которого срезаются гранями куба (рис. 1б). Исходные данные: $ab = c$ – длина ребра октаэдра; $bf = cx$ – часть ребра октаэдра, срезаемая гранью куба; $0 \leq x \leq 0.5$. Полная поверхность кристалла равна поверхности октаэдра, уменьшенной на площади 24 равносторонних треугольников со стороной sx , срезаемых гранями куба, и увеличенной на площадь граней куба, представляющих квадраты со стороной sx .

$$S_i = 2\sqrt{3}c^2 - 24 \frac{\sqrt{3}}{4} c^2 x^2 + 6c^2 x^2 = c^2 (3.464 - 4.392x^2) \quad 5$$

Объём кубооктаэдра равен объёму октаэдра, уменьшенному на объём 6 полуоктаэдров со стороной sx .

$$V = \frac{\sqrt{2}}{3}c^3 - 6\frac{\sqrt{2}}{6}c^3x^3 = c^3(0.471 - 1.414x^3) \quad 6$$

Определив из (6) параметр приведения c для условия $V = 1$ и подставив его в (5), получим F-функцию исследуемой комбинации простых форм для случая доминантного развития октаэдра:

$$F = (0.471 - 1.414x^3)^{-\frac{2}{3}} (3.464 - 4.392x^2) \quad 7$$

справедливую при $0 \leq x \leq 0.5$. Доля площади граней октаэдра f_o в общей поверхности кристалла для любого x из указанного интервала определяется из (5):

$$f_o = \frac{3.464 - 10.392x^2}{3.464 - 4.392x^2} = \frac{1 - 3x^2}{1 - 1.268x^2} \quad 8$$

Используя (3, 4, 7, 8), рассчитаем приведённую поверхность и долю граней октаэдра в полной поверхности кристалла (табл. 1).

Таблица 1. F-функция и доля октаэдра в огранении комбинации куб-октаэдр.

Доминантная форма	x	F	f0
{100}	0	6	0
	0.1	5.95	0.015
	0.2	5.84	0.047
	0.3	5.68	0.112
	0.4	5.51	0.213
	0.5	5.36	0.366
{111}	0.5	5.36	0.366
	0.4	5.26	0.652
	0.3	5.36	0.824
	0.2	5.51	0.927
	0.1	5.66	0.983
	0	5.72	1

Из табл. 1 видно, что зависимость между приведённой поверхностью кристалла и долей октаэдра в огранении параболическая. Найдём её аналитическое выражение:

$$F = af_o^2 + bf_o + c \quad 9$$

Для однозначного задания параболы достаточно знать координаты трёх точек (табл. 1):

$$F = \begin{cases} 6 \text{ (куб)} & \text{при } f_o = 0 \\ 5.36 \text{ (кубооктаэдр)} & \text{при } f_o = 0.366 \\ 5.72 \text{ (октаэдр)} & \text{при } f_o = 1 \end{cases} \quad 10$$

Подставив поочередно (10) в (9), получим систему уравнений, из которой найдём коэффициенты: $a = 2.32$, $b = -2.6$, $c = 6$. Выражение (9) примет вид:

$$F = 2.32 f_0^2 - 2.6 f_0 + 6 \quad 11$$

Для нахождения формы с минимальной приведённой поверхностью в комбинации куб-октаэдр достаточно продифференцировать (11) и, приравняв производную к нулю, решить уравнение:

$$dF / df_0 = 4.64 f_0 - 2.6 = 0, f_0 = 0.56 \quad 12$$

Минимальную приведённую поверхность в комбинации куб-октаэдр имеет кубооктаэдр при отношении площадей граней куба и октаэдра $0.44 : 0.56$. F-функция при этом равна 5.27. График функции (11) совмещён на рис. 3 с графиками других комбинационных пар

Комбинация куб – ромбододекаэдр

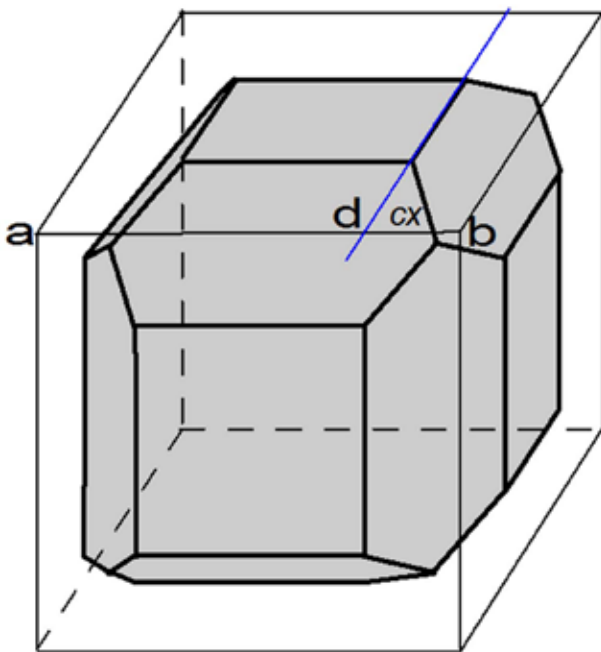


Рис. 2. Комбинация куба и ромбододекаэдра.

Исходные данные (рис. 2): c – длина ребра куба; cx – часть ребра, срезаемая гранью ромбододекаэдра; $0 \leq x \leq 0.5$. При $x = 0.5$ грани куба вырождаются и полиэдр приобретает форму ромбододекаэдра. Поскольку выше для комбинации куб-октаэдр показан вывод F-функции, здесь и далее для комбинаций других ПФ мы приводим лишь результаты в аналитическом, табличном и графическом виде. Геометрически выведенная F-функция для комбинации куб-ромбододекаэдр определяется выражением:

$$F = \left(1 - 6x^2 + 6x^3\right)^{\frac{2}{3}} \left(6 - 7.032x - 1.458x^2\right) \quad 13$$

Доля ромбододекаэдра в огранении определится формулой:

$$f_r = \frac{2.83x - 4.24x^2}{1 - 1.17x - 0.24x^2} \quad 14$$

Расчёты по формулам (13) и (14) даны в табл. 2. По ней выведем формулу приведённой поверхности комбинации куб – ромбододекаэдр как функции доли ромбододекаэдра в огранении:

$$F = 1.78f_r^2 - 2.43f_r + 6 \quad 15$$

Таблица 2. Приведённая поверхность и соответствующая ей доля ромбододекаэдра в ограничении комбинации куб – ромбододекаэдр.

x	F	fr
0	6	0
0.1	5.49	0.273
0.2	5.23	0.524
0.3	5.16	0.745
0.4	5.23	0.919
0.5	5.35	1

Продифференцируем (15) и приравняв производную к нулю, найдём форму кристалла с минимальной приведённой поверхностью в рассматриваемой комбинации.

$$dF / df_r = 3.56f_r - 2.45 = 0, f_r = 0.69 \quad 16$$

Минимальную приведённую поверхность в комбинации куб – ромбододекаэдр имеет полиэдр с отношением площадей граней куба и ромбододекаэдра 0.31 : 0.69. График (15) дан на рис. 3.

Найдём F-функцию для тех же комбинаций ПФ упрощённым аналитическим способом. Для этого минимум F-функции в каждой паре найдём с помощью ранее выведенной приближённой формулы. В качестве независимой переменной примем число граней n на полиэдре:

$$F(n) = 4.84 + \frac{1.28}{n} + \frac{82.08}{n^2} - \frac{288}{n^3} \quad 17$$

Для комбинации куб – октаэдр:

$$F(14) = 4.84 + \frac{1.28}{14} + \frac{82.08}{14^2} - \frac{288}{14^3} = 5.26.$$

Для комбинации куб – ромбододекаэдр:

$$F(18) = 4.84 + \frac{1.28}{18} + \frac{82.08}{18^2} - \frac{288}{18^3} = 5.12.$$

С учётом полученных значений минимума F-функции имеем для каждой пары координаты трёх точек параболы $F(f_r)$ для пар куб – октаэдр и куб – ромбододекаэдр:

$$F(f_o) = \begin{cases} 6 & \text{при } f_o = 0 \\ 5.26 & \text{при } f_o = \frac{-b}{2a} \\ 5.72 & \text{при } f_o = 1 \end{cases} \quad F(f_r) = \begin{cases} 6 & \text{при } f_r = 0 \\ 5.16 & \text{при } f_r = \frac{-b}{2a} \\ 5.35 & \text{при } f_r = 1 \end{cases} \quad 18$$

Подставив (18) в (9), получим две системы из трех уравнений, решив которые относительно неизвестных коэффициентов, получим приближённые выражения F -функции для рассматриваемых комбинаций.

$$\begin{aligned} F_a(f_o) &= 2.37f_o^2 - 2.65f_r + 6 \\ F_a(f_r) &= 2.01f_r^2 - 2.66f_r + 6 \end{aligned} \quad 19$$

Подстрочные индексы a и g в F -функции означают, что она определена аналитическим или геометрическим способом. В табл. 3 даны результаты сравнения расчётов F -функции геометрическим и аналитическим способами. Относительная погрешность аналитического вычисления на всём интервале изменения переменной не превышает 1%. Это делает правомочным аналитический вывод F -функции для других комбинаций ПФ.

Таблица 3. Сравнение расчётов F -функции для комбинаций куб-октаэдр и куб-ромбододекаэдр, выполненных геометрическим и аналитическим способами.

f_i	$F_g(f_i)$	$F_a(f_i)$	Относительная погрешность аналитического определения, %	$F_g(f_i)$	$F_a(f_i)$	Относительная погрешность аналитического определения, %
0	6	6	0	6	6	0
0.1	5.76	5.76	-0.08	5.77	5.75	-0.28
0.2	5.57	5.56	-0.14	5.58	5.55	-0.52
0.3	5.43	5.42	-0.19	5.42	5.38	-0.70
0.4	5.33	5.32	-0.23	5.30	5.26	-0.82
0.5	5.28	5.27	-0.24	5.22	5.17	-0.87
0.56*	5.27	5.26	-0.23	5.19	5.14	-0.86
0.6	5.28	5.26	-0.23	5.17	5.13	-0.84
0.69	5.31	5.30	-0.20	5.16	5.12	-0.75
0.7	5.32	5.31	-0.20	5.16	5.12	-0.74
0.8	5.40	5.40	-0.15	5.19	5.16	-0.56
0.9	5.54	5.53	-0.08	5.25	5.23	-0.31
1	5.72	5.72	0.00	5.35	5.35	0

*Примечание: жирным шрифтом выделены координаты минимума F -функции.

Комбинации октаэдр – ромбододекаэдр, тетраэдр – куб, тетраэдр – ромбододекаэдр

Выражения, описывающие изменение F -функции в этих комбинациях постоянных форм, найдём упрощённым аналитическим способом, как это сделано для пар куб-октаэдр и куб-ромбододекаэдр. Сначала для пары октаэдр-ромбододекаэдр вычислим минимумы F -функции, воспользовавшись (17). Для комбинаций с участием тетраэдра применим формулу [1]:

$$F(n) = 4.84 + \frac{6.92}{n} - \frac{19.44}{n^2} + \frac{118}{n^3} \quad 20$$

Результаты вычислений и координаты трёх точек парабол даны в табл. 4.

Таблица 4. Расчёт координат реперных точек параболы для вывода F -функции комбинаций двух постоянных форм.

Комбинации, i/j	n	$F(n)$	Координаты точек параболы					
			f_j	$F(f_j)$	f_j	$F(f_j)$	f_j	$F(f_j)$
октаэдр – ромбододекаэдр	20	5.07	0	5.72	5.07	$(-b/2a)$	1	5.35
тетраэдр – куб	10	5.46	0	7.2	5.46	$(-b/2a)$	1	6
тетраэдр – ромбододекаэдр	16	5.23	0	7.2	5.23	$(-b/2a)$	1	5.35

Используя табл. 4, для каждой пары постоянных форм составим систему уравнений: а) для комбинации октаэдр-ромбододекаэдр:

$$\begin{cases} c = 5.72 & \text{при } f_r = 0 \\ \frac{-b^2}{4a} + c = 5.07 & \text{при } f_r = -b/2a \\ a + b + c = 5.35 & \text{при } f_r = 1 \end{cases} \quad 21$$

б) для комбинации тетраэдр-куб:

$$\begin{cases} c = 7.2 & \text{при } f_c = 0 \\ \frac{-b^2}{4a} + c = 5.46 & \text{при } f_c = -b/2a \\ a + b + c = 6 & \text{при } f_c = 1 \end{cases} \quad 22$$

в) для комбинации тетраэдр-ромбододекаэдр:

$$\begin{cases} c = 7.2 & \text{при } f_r = 0 \\ \frac{-b^2}{4a} + c = 5.23 & \text{при } f_r = -b/2a \\ a + b + c = 5.35 & \text{при } f_r = 1 \end{cases} \quad 23$$

Решив (21-23) относительно неизвестных констант, получим F -функции для рассматриваемых комбинационных пар: а) для комбинации октаэдр-ромбододекаэдр

$$F = 1.77 f_r^2 - 2.14 f_r + 5.72 \quad 24$$

б) для комбинации тетраэдр-куб

$$F = 4.24 f_c^2 - 5.44 f_c + 7.2 \quad 25$$

в) для комбинации тетраэдр-ромбододекаэдр

$$F = 3.09 f_r^2 - 4.94 f_r + 7.2 \quad 26$$

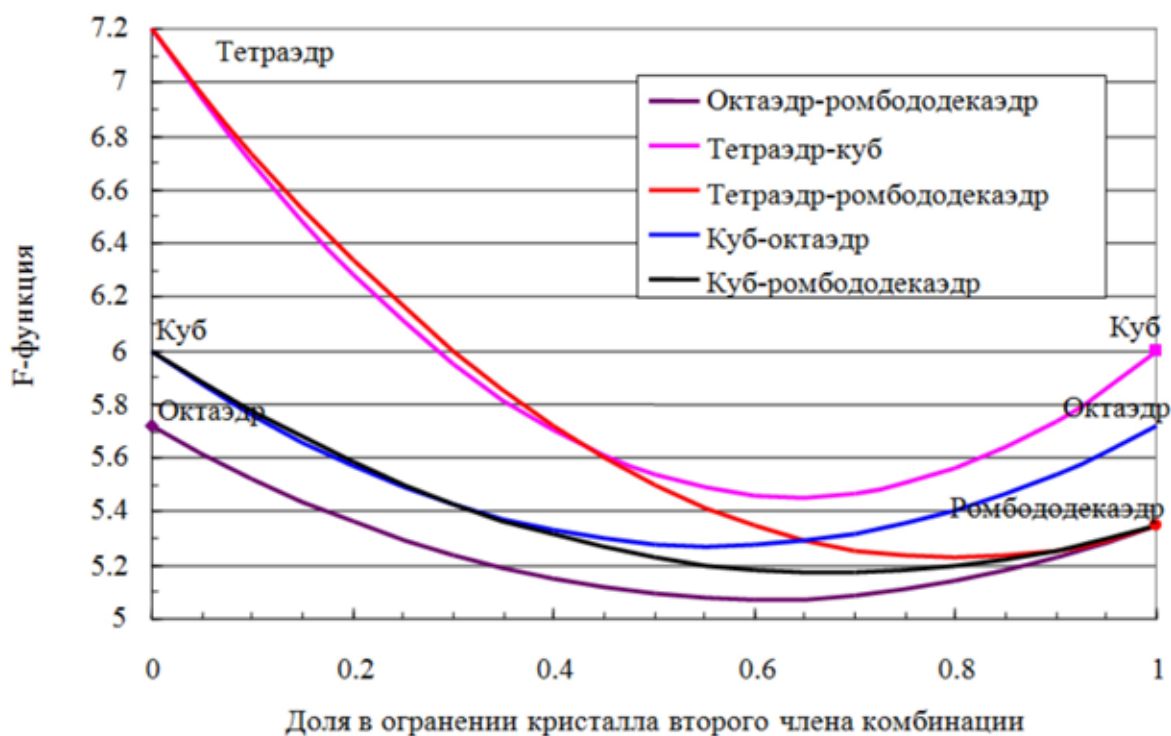


Рис. 3. F -функция комбинации двух постоянных форм кубической сингонии.

Графики F -функции двойных комбинаций постоянных простых форм кубической сингонии даны на рис. 3.

Формулы (11, 15, 24-26) и их графики (рис. 3) описывают подавляющее число габитусов кристаллов кубической сингонии.

Список литературы

1. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Физматгиз, 1964. С. 83-86, 211-213.

Статья 4. РАСЧЕТ F -ФУНКЦИИ КОМБИНАЦИЙ С УЧАСТИЕМ ПЕРЕМЕННЫХ ФОРМ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Пять классов симметрии кубической сингонии объединяют 15 теоретически возможных ПФ, 4 из которых представлены постоянными (тетраэдр, куб, октаэдр, ромбододекаэдр), остальные 11 переменными полиэдрами. Из 105 возможных двойных комбинаций в силу кристаллографической несовместимости ряда ПФ возможны 65 (табл.1).

Из 65 теоретически возможных двойных комбинаций в ограничении кристаллов встречается их ограниченное число. Как правило, это комбинации постоянных форм либо комбинации одной постоянной и одной переменной формы. Вывод формул F -функции кристаллов, образованных комбинацией двух постоянных форм, выполнен в предыдущей статье. Комбинации с участием переменных форм более сложны. Их приведённая поверхность зависит

от двух переменных – линейной и угловой. Математические выражения, описывающие поведение F -функции для частых комбинаций с участием переменных форм найдём геометрическим способом. Для других комбинаций выведем приближённые F -функции аналитическим методом. Для начала найдём F -функции комбинаций куба с ПФ в голоэдрическом классе симметрии: тетрагексаэдром, тригонтриоктаэдром, тетрагонтриоктаэдром и гексоктаэдром.

Таблица 1. Двойные комбинации ПФ кубической сингонии.

№	ПФ	Номер ПФ														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	куб															
2	ромбододекаэдр	+														
3	октаэдр	+	+													
4	тетрагексаэдр	+	+	+												
5	тригонтриоктаэдр	+	+	+	+											
6	тетрагонтриоктаэдр	+	+	+	+	+										
7	гексоктаэдр	+	+	+	+	+	+									
8	пентагонтриоктаэдр	+	+	+	+	+	+	-								
9	дидодекаэдр	+	+	+	-	+	+	-	-							
10	пентагондододекаэдр	+	+	+	-	+	+	-	-	+						
11	тетраэдр	+	+	-	+	-	-	-	-	-	+					
12	тригонритетраэдр	+	+	-	+	-	-	-	-	-	+	+				
13	тетрагонритетраэдр	+	+	-	+	-	-	-	-	-	+	+	+			
14	гексатетраэдр	+	+	-	+	-	-	-	-	-	-	+	+	+		
15	пентагонритетраэдр	+	+	-	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	-	
Всего форм в столбце		14	13	7	8	5	4	0	0	1	4	4	3	2	0	N=65

Примечание: + разрешенные, – запрещённые комбинации.

Комбинация куб – тетрагексаэдр {hk0}

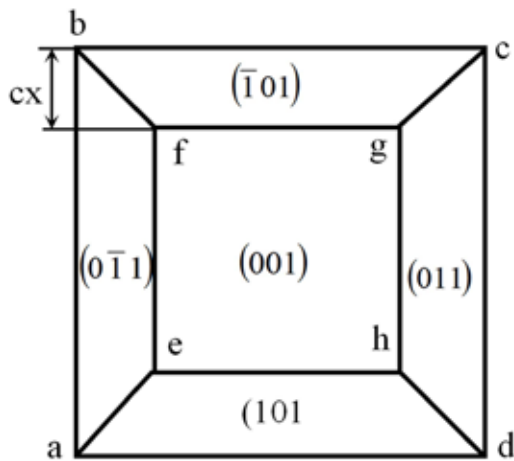


Рис. 1. Проекция граней усечённой пирамиды на базовую грань куба.

Комбинация куб – тетрагексаэдр получается «надстраиванием» на гранях куба усечённых тетрагональных пирамид. Проекция образующихся граней на базовую грань куба дана на рис. 1. Исходные данные: S – площадь нижнего основания пирамиды $abcd$ (грани исходного куба); λ – угол между гранями куба и пирамиды; c – длина ребра исходного куба (параметр приведения); c' – длина ребра производного куба; P, p – периметры оснований пирамиды; cx – одностороннее уменьшение ребра исходного куба; h – высота усеченной пирамиды.

Выразим геометрические параметры пирамиды через параметр приведения c : $ab = c$, $ef = c' = c(1 - 2x)$, $S = c^2$, $P = 4c$, $p = 4c(1 - 2x)$, $\alpha = cx / \cos \lambda$, $h = cx \operatorname{tg} \lambda$. Тогда площадь боковой поверхности пирамиды M равна:

$$M = \frac{P+p}{2} \alpha = \frac{4c+4c(1-2x)}{2} \cdot \frac{cx}{\cos \lambda} = c^2 \frac{4x-4x^2}{\cos \lambda} \quad 1$$

Площадь полной поверхности кристалла S_{Σ} равна сумме площадей поверхности 6 пирамид и куба:

$$S_{\Sigma} = 6M + 6(ef)^2 = 6 \cdot c^2 \frac{4x-4x^2}{\cos \lambda} + 6c^2(1-2x)^2 = 6c^2 \left[\frac{4x-4x^2}{\cos \lambda} + (1-2x)^2 \right] \quad 2$$

Объём кристалла равен сумме объёмов усеченных пирамид [2] и куба:

$$V = 6 \frac{hS}{3} \left[1 + \frac{c'}{c} + \left(\frac{c'}{c} \right)^2 \right] + c^3 = c^3 \left[1 + (6x - 12x^2 + 8x^3) \operatorname{tg} \lambda \right] \quad 3$$

Таблица 2. F -функции комбинаций ПФ в системе куб – тетрагексаэдр.

Комбинация куба с $\{hk0\}$	$F_{(hk0)}$	Параметры по (4, 5) при $x < 0.5$		$\lambda_{(hk0)/(100)}^*$	F -функции
		$f_{\{hhl\}}$	$f_{\{hhl\}}$		
$\{210\}$	5.12	0.919	5.1	26° 34/	$F = 1.21 f_{th}^2 - 2.09f + 6$
$\{540\}$	5.19	0.793	5.1	38 39	$F = 1.58 f_{th}^2 - 2.39f + 6$
$\{430\}$	5.16	0.789	5.09	36 52	$F = 1.49 f_{th}^2 - 2.33f + 6$
$\{320\}$	5.13	0.863	5.08	33 41	$F = 1.44 f_{th}^2 - 2.31f + 6$
$\{530\}$	5.11	0.860	5.08	30 58	$F = 1.32 f_{th}^2 - 2.2f + 6$
$\{520\}$	5.16	0.942	5.156	21 48	$F = 1.03 f_{th}^2 - 1.87f + 6$
$\{310\}$	5.22	0.958	5.217	18 26	$F = 0.91 f_{th}^2 - 1.69f + 6$
$\{410\}$	5.33	0.957	5.3295	14 02	$F = 0.71 f_{th}^2 - 1.38f + 6$
$\{510\}$	5.42	0.99019	5.418	11 18	$F = 0.63 f_{th}^2 - 1.21f + 6$
$\{610\}$	5.49	0.99013	5.489	9 27	$F = 0.54 f_{th}^2 - 1.05f + 6$
$\{110\}$	5.35	0.5	5.21	45°	$F = 1.82 f_{th}^2 - 2.48f + 6$

* Здесь и далее использована таблица граничных углов кристаллов кубической сингонии [3].

Из (3) находим параметр приведения для условия $V = 1$ и, подставив его в (2), получим F -функцию для комбинации куба и тетрагексаэдра:

$$F(x, \lambda) = \left[1 + (6x - 12x^2 + 8x^3) \operatorname{tg} \lambda \right]^{\frac{2}{3}} 6 \left[\frac{4x - 4x^2}{\cos \lambda} + (1 - 2x)^2 \right] \quad 4$$

Доля f_{th} тетрагексаэдра в комбинационной форме кристалла определяется выражением:

$$f_{th} = \frac{4x - 4x^2}{4x - 4x^2 + (1 - 2x)^2 \cos \lambda} \quad 5$$

Выразим (4) в канонической параболической форме: $F = \varphi(f_{th})$. Константы рассчитаем с помощью (4, 5) для каждой разновидности тетрагексаэдра. Такие расчёты не выполнялись выше. В табл. 2 даны полученные F -функции для комбинаций куба и одного из тетрагексаэдров.

Поведение F -функции в комбинациях (табл. 2) отражено на рис. 2. Как частный случай, из (4) при $\lambda = 45^\circ$ получается выражение для часто встречаемой комбинации постоянных форм: куба и ромбододекаэдра.

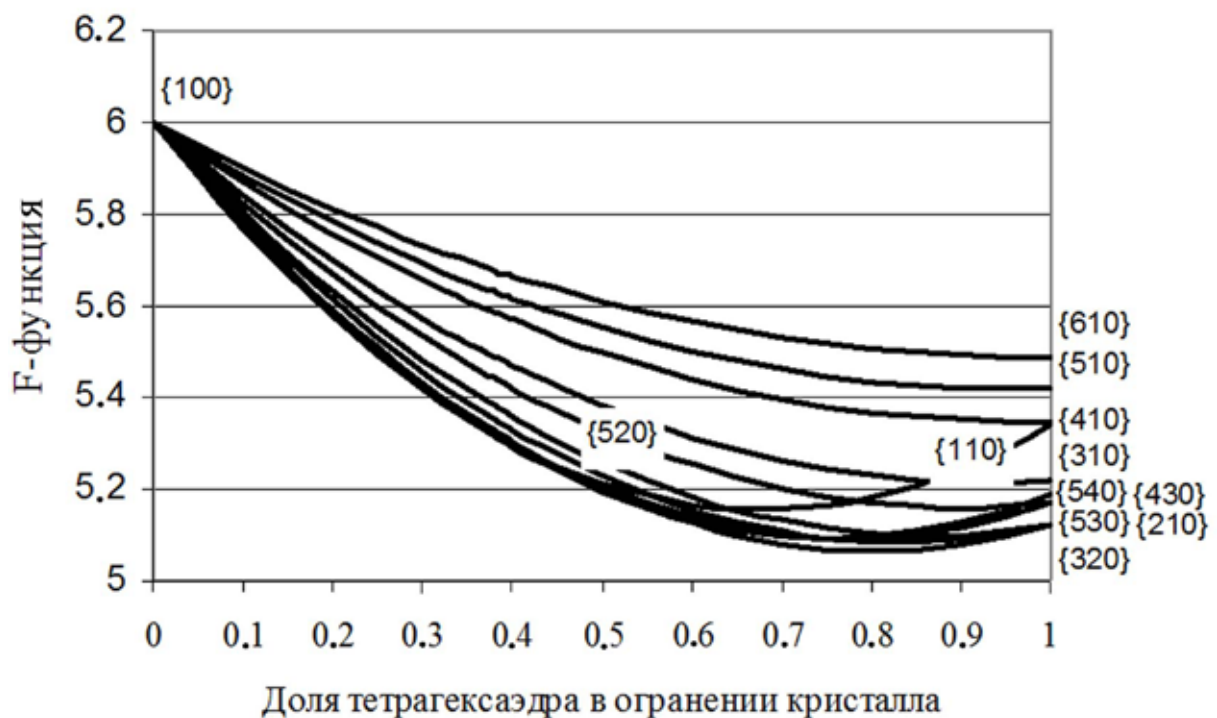


Рис. 2. Изменение F -функции для комбинаций куб – тетрагексаэдр.

Комбинация куб – тетрагонтриоктаэдр

Найдём площади граней куба и тетрагонтриоктаэдра (S_6 и S_{24}) и объём полиэдра, выразив их через длину ребра куба c . Для нахождения площадей обратимся к рис. 3а, на котором изображена грань куба, одна из вершин которой притупляется тремя гранями тетрагонтриоктаэдра $\{hhl\}$, $h < 1$. Исходные данные: $ab = c$ – длина ребра куба; $bd = cx$ – часть ребра куба, срезаемая гранью (hhl) . Для упрощения расчётов зададимся интервалом изменения переменной $0 \leq x \leq 0.5$. Как видно из рис. 3а, площадь каждой грани куба при образовании комбинационной формы уменьшается на площади четырех треугольников bcd . Суммарная площадь граней куба на комбинационном полиэдре равна:

$$S_6 = 6c^2 - 6 \cdot 4S_{\Delta bcd} = 6c^2 - 24 \frac{c^2 x^2}{2} = 6c^2(1 - 2x^2) \quad 6$$

Площадь граней тетрагонтриоктаэдра определим из рис. 3б, на котором дан первый октант куба, вершина которого срезается тремя гранями тетрагонтритетраэдра. Они сходятся в вершине i , образуя трёхгранную пирамиду $cdei$, основанием которой является треугольник cde параллельный плоскости (111) . Двугранный угол между боковыми гранями и основанием обозначим $\lambda_{(hhl)/(111)}$. Площадь боковой поверхности пирамиды $cdei$ равна:

$$M = \frac{S_{\Delta cde}}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} = \frac{\sqrt{3} \cdot 2c^2 x^2}{4 \cos \lambda_{(hhl)/(111)}} = \frac{\sqrt{3}}{2 \cos \lambda_{(hhl)/(111)}} c^2 x^2 \quad 7$$

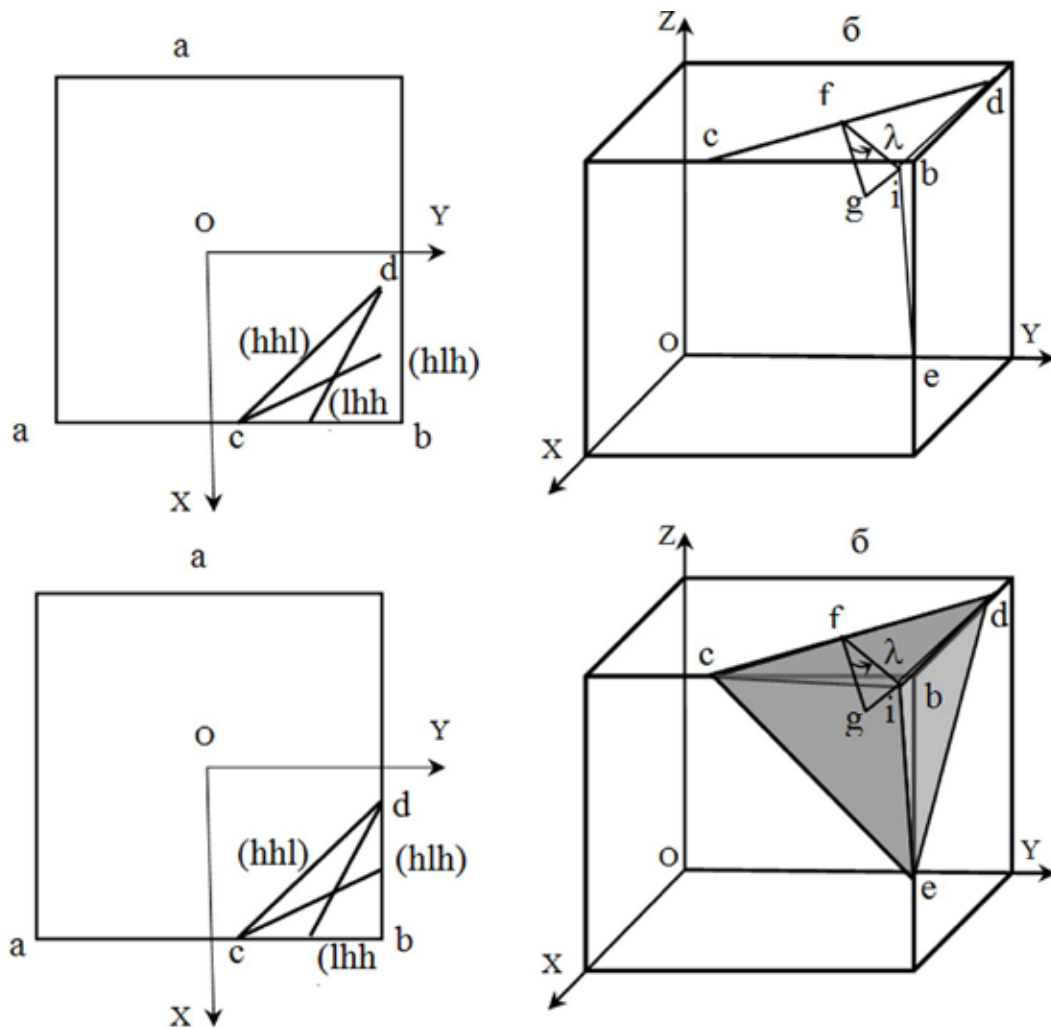


Рис. 3. Расчёт площади поверхности комбинационного полиэдра $\{100\} / \{hhl\}_{h < c}$

Площадь поверхности комбинационного полиэдра $\{100\} / \{hhl\}_{h < c}$ равна:

$$S = S_6 + 8M = 6c^2(1 - 2x^2) + \frac{4\sqrt{3}}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} c^2 x^2 = c^2 \left(6 - 12x^2 + \frac{4\sqrt{3}x^2}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \quad 8$$

Объём полиэдра равен объёму куба, уменьшенному на 8 трёхгранных пирамид $cdeb$ и увеличенному на 8 трёхгранных пирамид $cdei$:

$$V = V_{\{100\}} - 8V_{cdeb} + 8V_{cdei} = c^3 - 8\frac{1}{3}S_{\Delta cde} \cdot gb + 8\frac{1}{3}S_{\Delta cde} \cdot gi = c^3 - \frac{4c^2x^2}{\sqrt{3}}(gb - gi) \quad 9$$

Определим разность высот пирамид:

$$\begin{aligned} (gb - gi) &= (fg) \cdot tg\lambda_{(111)/(100)} - (fg) \cdot tg\lambda_{(hhl)/(111)} = \frac{cx\sqrt{2}}{3} \sin 60^\circ (1.414 - tg\lambda_{(hhl)/(111)}) = \\ &= \frac{cx}{\sqrt{6}} (1.414 - tg\lambda_{(hhl)/(111)}) \end{aligned} \quad 10$$

Подставив (10) в (9), получим объём полиэдра:

$$V = c^3 - \frac{4c^3x^3}{3\sqrt{2}} (1.414 - tg\lambda_{(hhl)/(111)}) = c^3 \left[1 - \frac{4x^3}{3\sqrt{2}} (1.414 - tg\lambda_{(hhl)/(111)}) \right] \quad 11$$

Определив из (11) параметр приведения c при $V = 1$ и подставив его в (8), получим F -функцию для комбинации куба и тетрагонтриоктаэдра:

$$F = \left[1 - \frac{4x^3}{3\sqrt{2}} (1.414 - tg\lambda_{(hhl)/(111)}) \right]^{\frac{2}{3}} \left(6 - 12x^2 + \frac{4\sqrt{3}x^2}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \text{ для } \begin{matrix} 0 \leq x \leq 0.5 \\ 0 < \lambda < 54^\circ 44' \end{matrix} \quad 12$$

При $\lambda_{(hhl)/(111)} = 0$ (12) преобразуется в F -функцию комбинации куб – октаэдр.

Выразим (12) в канонической параболической форме $F = \varphi(f_{4t})$. Доля граней тетрагонтриоктаэдра f_{4t} в огранении кристалла определится из (8):

$$f_{4t} = \frac{4\sqrt{3}x^2}{(6 - 12x^2)\cos \lambda_{(hhl)/(111)} + 4\sqrt{3}x^2} \text{ при } x \leq 0.5 \quad 13$$

Таблица 3. F -функции комбинаций в системе куб – тетрагонтриоктаэдр.

Комбинация куба с $\{hhl\}_{h<l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры по (11, 12) при $x = 0.5$		$\lambda_{(hhl)/(100)}$	F -функция
		$f_{\{hhl\}}$	$F(f_{\{hhl\}})$		
$\{112\}$	5.10	0.379	5.29	$19^\circ 28'$	$F = 1.58 f_{4t}^2 - 2.48f + 6$
$\{334\}$	5.37	0.368	5.29	$8^\circ 03'$	$F = 2.04 f_{th}^2 - 2.67f + 6$
$\{223\}$	5.28	0.37	5.283	$11^\circ 25'$	$F = 1.94 f_{th}^2 - 2.66f + 6$
$\{335\}$	5.18	0.373	5.28	$14^\circ 25'$	$F = 1.77 f_{th}^2 - 2.59f + 6$
$\{225\}$	5.07	0.389	5.32	$25^\circ 14'$	$F = 1.36 f_{th}^2 - 2.28f + 6$
$\{113\}$	5.09	0.398	5.35	$29^\circ 30'$	$F = 1.18 f_{th}^2 - 2.09f + 6$
$\{114\}$	5.18	0.414	5.43	$35^\circ 16'$	$F = 0.97 f_{th}^2 - 1.79f + 6$
$\{115\}$	5.27	0.425	5.49	$38^\circ 57'$	$F = 0.81 f_{th}^2 - 1.54f + 6$
$\{116\}$	5.35	0.435	5.55	$41^\circ 28'$	$F = 0.7 f_{th}^2 - 1.34f + 6$

Поведение F -функции в комбинациях (табл. 3) дано на рис. 4.

Константы рассчитаем по координатам (f_{4t} , F) трёх реперных точек: $(0; 6)$, $(1; F_{(hhl)})$, $[f_{4t}(x=0.5), F(x=0.5)]$. Значения F -функции тетрагонтриоктаэров найдены ранее, а координаты третьей точки рассчитаем по формулам (12, 13) для каждой разновидности тетрагонтриоктаэдра. В табл. 3 даны полученные F -функции для комбинаций куба и одного из тетрагонтриоктаэров.

Комбинация куба с наиболее распространённой габитусной формой тетрагонтриоктаэдра $\{211\}$ даёт в сравнении с его другими комбинациями наиболее глубокий минимум F -функции.

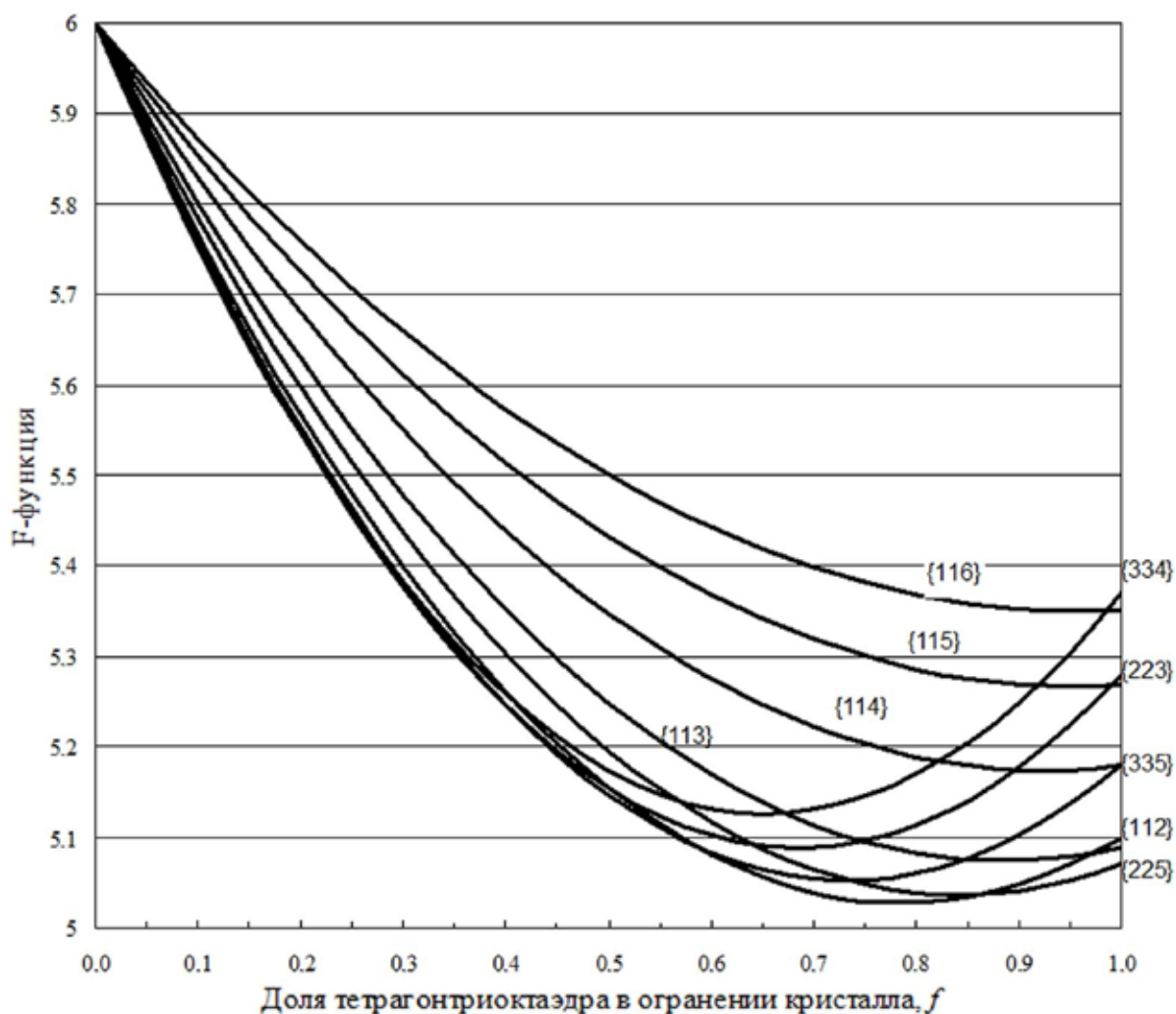


Рис. 4. Изменение F -функции для комбинаций куб – тетрагонтриоктаэдр.

Комбинация куб – тригонтриоктаэдр

F -функцию этой комбинации выведем комбинированным способом. Чтобы применить аналитический метод и представить F -функции в параболическом виде, надо знать координаты трёх точек пары куб – тригонтриоктаэдр $\{hhl\}_{h>l}$. Координаты двух точек (куба и тригонтриоктаэдров $\{hhl\}$) определены выше. Третью точку найдём геометрическим методом. На рис. 5 даны проекции граней тригонтриоктаэдра, притупляющих одну из вершин куба, на грань (001) (рис. 5а) и сечение вершины куба гранью тригонтриоктаэдра

(hhl) (рис. 5б). Определим площадь поверхности и объём комбинационного полиэдра, доминантной формой которого является куб с длиной ребра c . Гранями тригонтриоктаэдра на ребрах куба отсекаются отрезки $ac = cd = l/l = cx$, $ec = cb = 1/h = cxl/h$.

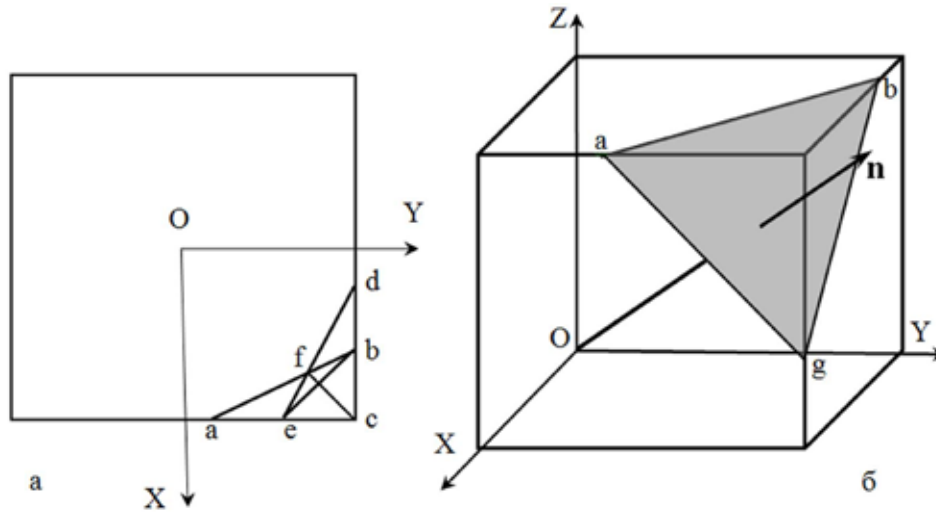


Рис. 5. Расчёт площади поверхности и объёма комбинационного полиэдра $\{100\}/\{hhl\}_{h>l}$

Площадь полной поверхности комбинационного полиэдра $\{100\}/\{hhl\}_{h>l}$ равна сумме площадей остаточной поверхности куба $S_{\{100\}}$ и граней тригонтриоктаэдра $S_{\{hhl\}}$:

$$S_{\{100\}} = 6c^2 - 48S_{\Delta afc} \quad 14$$

Определим элементы треугольника afc :

$$\angle fac = \alpha; \angle acf = 45^\circ; \angle afc = 135^\circ - \alpha; ac = cx; cf = cx \sin \alpha / \sin(135^\circ - \alpha).$$

Его площадь треугольника равна:

$$S_{\Delta afc} = \frac{1}{2} ac \cdot cf \sin 45^\circ = \frac{c^2 x^2 \sin \alpha}{2\sqrt{2} \sin(135^\circ - \alpha)} \quad 15$$

Подставив (15) в (14), получим площадь остаточной поверхности куба:

$$S_{\{100\}} = 6c^2 - \frac{12\sqrt{2} c^2 x^2 \sin \alpha}{\sin(135^\circ - \alpha)} \quad 16$$

Площадь граней тригонтриоктаэдра $S_{\{hhl\}}$ равна:

$$S_{\{hhl\}} = 48S_{\Delta afc} \cos \lambda_{(hhl)/(100)} = \frac{12\sqrt{2} c^2 x^2 \sin \alpha \cos \lambda_{(hhl)/(100)}}{\sin(135^\circ - \alpha)} \quad 17$$

Сложив (16) и (17), получим площадь поверхности комбинационного полиэдра для $x \leq 0.5$:

$$S = 6c^2 \left[1 - \frac{2\sqrt{2}x^2 \sin \alpha}{\sin(135 - \alpha)} (1 - \cos \lambda_{(hhl)/(100)}) \right] \quad 18$$

Объем комбинационного полиэдра $\{100\}/\{hhl\}_{h>l}$ определим по формуле Минковского [1]. Для этого определим нормали к грани тригонтриоктаэдра, проведенной из начала координат. На рис. 5б дана грань тригонтриоктаэдра $(hhl)_{h>l}$, секущая ребра куба в трех точках a, b, g . Определим координаты точек:

$$a: \left(\frac{c}{2}; \frac{c}{2} - cx; \frac{c}{2} \right), \quad b: \left(\frac{c}{2} - cx \frac{l}{h}; \frac{c}{2}; \frac{c}{2} \right), \quad g: \left(\frac{c}{2}; \frac{c}{2}; \frac{c}{2} - cx \frac{l}{h} \right) \quad 19$$

Составим уравнение плоскости, проходящей через три точки (19):

$$\begin{vmatrix} X - \frac{c}{2} & Y - \frac{c}{2} + cx & Z - \frac{c}{2} \\ -cx \frac{l}{h} & cx & 0 \\ 0 & cx & -cx \frac{l}{h} \end{vmatrix} = 0 \quad 20$$

Это даёт уравнение грани тригонтриоктаэдра:

$$-2hX - 2lY - 2hZ + c(2h + l - 2lx) = 0 \quad 21$$

Нормаль к грани тригонтриоктаэдра, проведенная из начала координат, равна свободному члену (21), умноженному на нормирующий множитель $1/\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}$ [2]:

$$n_{(hhl)} = c \frac{2h + l - 2lx}{\sqrt{8h^2 + 4l^2}} \quad 22$$

Подставив (16), (17), (22) в формулу Минковского с учётом того, что нормаль к грани куба равна $c/2$, получим объёма комбинационного полиэдра:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{3} (n_{(100)} S_{\{100\}} + n_{(hhl)} S_{\{hhl\}}) = \frac{1}{3} \left[\frac{c}{2} \left(6c^2 - \frac{12\sqrt{2}c^2x^2 \sin \alpha}{\sin(135 - \alpha)} \right) + c \frac{2h + l - 2lx}{\sqrt{8h^2 + 4l^2}} \cdot \frac{12\sqrt{2}c^2x^2 \sin \alpha \cos \lambda}{\sin(135 - \alpha)} \right] = \\ &= c^3 \left[1 - \frac{2\sqrt{2}x^2 \sin \alpha}{\sin(135 - \alpha)} \left(1 - \frac{2h + l - 2lx}{\sqrt{8h^2 + 4l^2}} 2 \cos \lambda_{(hhl)/(100)} \right) \right] \end{aligned} \quad 23$$

Подставив (18) и (23) в формулу приведенной поверхности для $V = 1$, получим F -функцию для комбинации куб – тригонтриоктаэдр:

$$F = V^{\left(-\frac{2}{3}\right)} S = \left[1 - \frac{2\sqrt{2}x^2 \sin \alpha}{\sin(135 - \alpha)} \left(1 - \frac{2h + l - 2lx}{\sqrt{8h^2 + 4l^2}} 2 \cos \lambda_{\{hhl\}/(100)} \right) \right]^{-\frac{2}{3}} \cdot \left[6 - 12\sqrt{2}x^2 \frac{\sin \alpha}{\sin(135 - \alpha)} (1 - \cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}) \right] \quad \text{для } 0 \leq x \leq 0.5 \quad 24$$

Выразим F -функцию через долю тригонтриоктаэдра $f_{\{hhl\}}$ в огранении комбинационного полиэдра. Заметим, что

$$f_{\{hhl\}} = \frac{12\sqrt{2}x^2 \sin \alpha \cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}}{6 \sin(135 - \alpha) - 12\sqrt{2}x^2 \sin \alpha (1 - \cos \lambda_{\{hhl\}/(100)})} \quad 25$$

а угол α выражается через символы грани тригонтриоктаэдра:

$$\alpha = \arctg(l/h) \quad 26$$

Используем (24) и (25) для вычисления F -функции и доли тригонтриоктаэдра при $x = 0.5$, принятых за координаты третьей реперной точки для расчёта параболического уравнения F -функции (табл. 4).

Таблица 4. F -функция комбинационных форм в системе куб – тригонтриоктаэдр.

Комбинация куба с $\{hhl\}_{h>l}$	$F_{\{hhl\}}$	Параметры, определенные по (23) и (24) при $x=0.5$		$\lambda_{\{hhl\}/(100)}$	F -функция
		$f_{\{hhl\}}$	$Ff_{\{hhl\}}$		
{443}	5.44	0.32	5.38	51 20	$F = 2.03 f_{th}^2 - 2.59f + 6$
{332}	5.37	0.3	5.41	50 14	$F = 1.91 f_{th}^2 - 2.54f + 6$
{221}	5.26	0.25	5.47	48 11	$F = 1.83 f_{th}^2 - 2.57f + 6$
{552}	5.23	0.21	5.52	47 07	$F = 1.85 f_{th}^2 - 2.62f + 6$
{331}	5.22	0.19	5.59	46 30	$F = 1.77 f_{th}^2 - 2.55f + 6$
{441}	5.22	0.15	5.66	45 52	$F = 1.78 f_{th}^2 - 2.56f + 6$

Поведение F -функции в комбинациях (табл. 4) графически дано на рис. 6.

F -функции наиболее часто встречаемых с кубом тригонритетраэдров {221}, {552}, {331}, {441} имеют близкие минимумы в области доминантного развития тригонтриоктаэдров. В огранении кристаллов они не образуют габитусных форм. В области доминантного развития куба F -функции его комбинаций с различными тригонтриоктаэдрами отличаются не очень. Заметное различие начинается с $f_{\{hhl\}} > 0.3$.

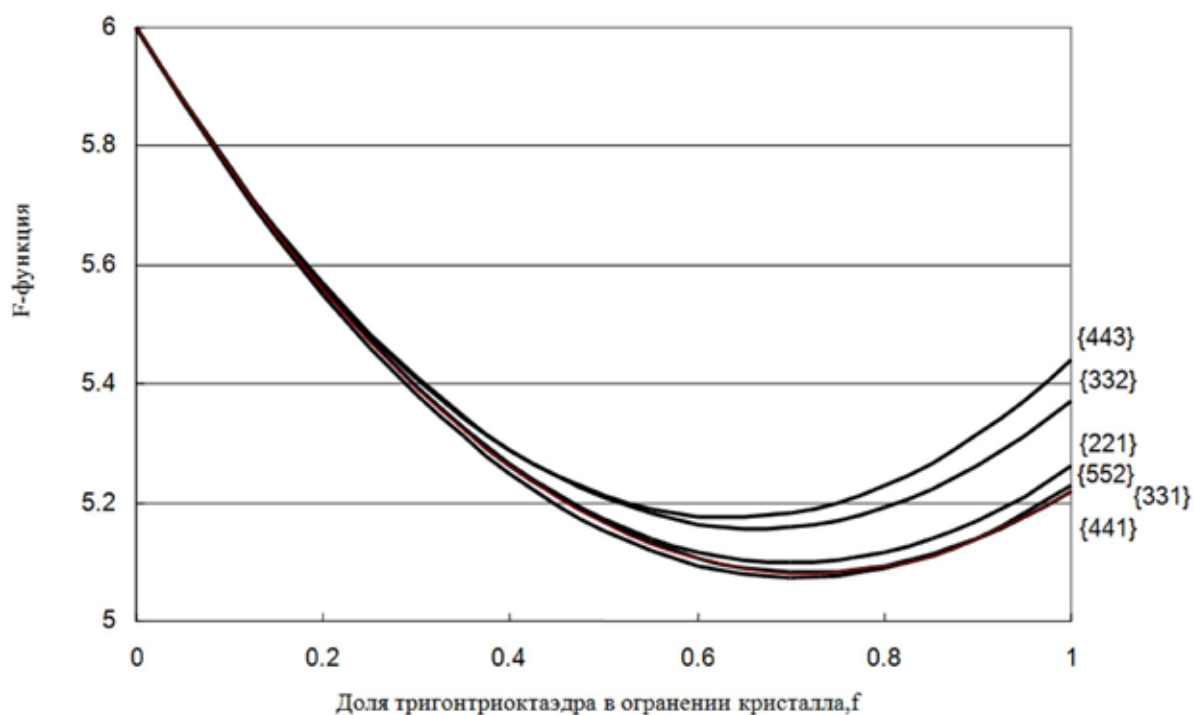


Рис. 6. Изменение F-функции для комбинаций куб – тригонтриоктаэдр.

Комбинация куб – гексоктаэдр

F-функцию этой комбинации выведем аналитическим способом. Определим минимум F-функции для всего семейства комбинаций куб – гексоктаэдр по известной формуле для $n = 54$:

$$F(54) = 4.84 + \frac{1.28}{54} + \frac{82.08}{54^2} - \frac{288}{54^3} = 4.89 \quad 27$$

Это значение минимума припишем комбинации куба и разновидности гексоктаэдра с минимумом приведённой поверхности. Это гексоктаэдр $\{431\}$ с $F = 4.9$. Минимум F-функции комбинации куба с i -ым гексоктаэдром пропорционален его приведённой поверхности:

$$F_{(100)/(hkl)}^{\min} = 4.89 \frac{F_i}{4.9} = 0.998 F_i \quad 28$$

Вычисленные по (28) минимальные значения F-функции комбинации куба с гексоктаэдром $\{hkl\}$ (табл. 5) использованы в качестве координаты третьей точки для вывода параболической формулы F-функции рассматриваемой комбинации.

По табл. 5 найдены параболические уравнения, описывающие F-функцию в зависимости от доли гексоктаэдра f_{hx} в ограничении:

$$\begin{aligned}
 F_{(100)/(432)} &= 1.19f_{hx}^2 - 2.15f_{hx} + 6 & F_{(100)/(421)} &= 1.31f_{hx}^2 - 2.4f_{hx} + 6 \\
 F_{(100)/(532)} &= 1.3f_{hx}^2 - 2.37f_{hx} + 6 & F_{(100)/(431)} &= 1.34f_{hx}^2 - 2.44f_{hx} + 6 \\
 F_{(100)/(321)} &= 1.31f_{hx}^2 - 2.39f_{hx} + 6 & F_{(100)/(521)} &= 1.28f_{hx}^2 - 2.33f_{hx} + 6 \\
 & & F_{(100)/(631)} &= 1.3f_{hx}^2 - 2.35f_{hx} + 6
 \end{aligned}$$

29

Таблица 5. Расчёт реперных точек параболы для вывода F -функции комбинации куба и гексоктаэдра.

Комбинация куба с {hkl}	$F_{(hkl)}$	Координаты точек параболы					
		f_{hx}	$F(f_{hx})$	f_{hx}	$F(f_{hx})$	f_{hx}	$F(f_{hx})$
{432}	5.04	0	6	$(-b/2a)$	5,03	1	5.04
{532}	4.93	0	6	$(-b/2a)$	4.92	1	4.93
{321}	4.92	0	6	$(-b/2a)$	4.91	1	4.92
{421}	4.91	0	6	$(-b/2a)$	4.90	1	4.91
{431}	4.90	0	6	$(-b/2a)$	4.89	1	4.90
{521}	4.95	0	6	$(-b/2a)$	4.94	1	4.95
{631}	4.94	0	6	$(-b/2a)$	4.93	1	4.94

Графики (29) даны на рис. 7. До $f_{hx} = 0.65$ значения F -функции для комбинации куба с различными гексоктаэдрами, за исключением комбинации {100}/{432}, существенно не различаются.

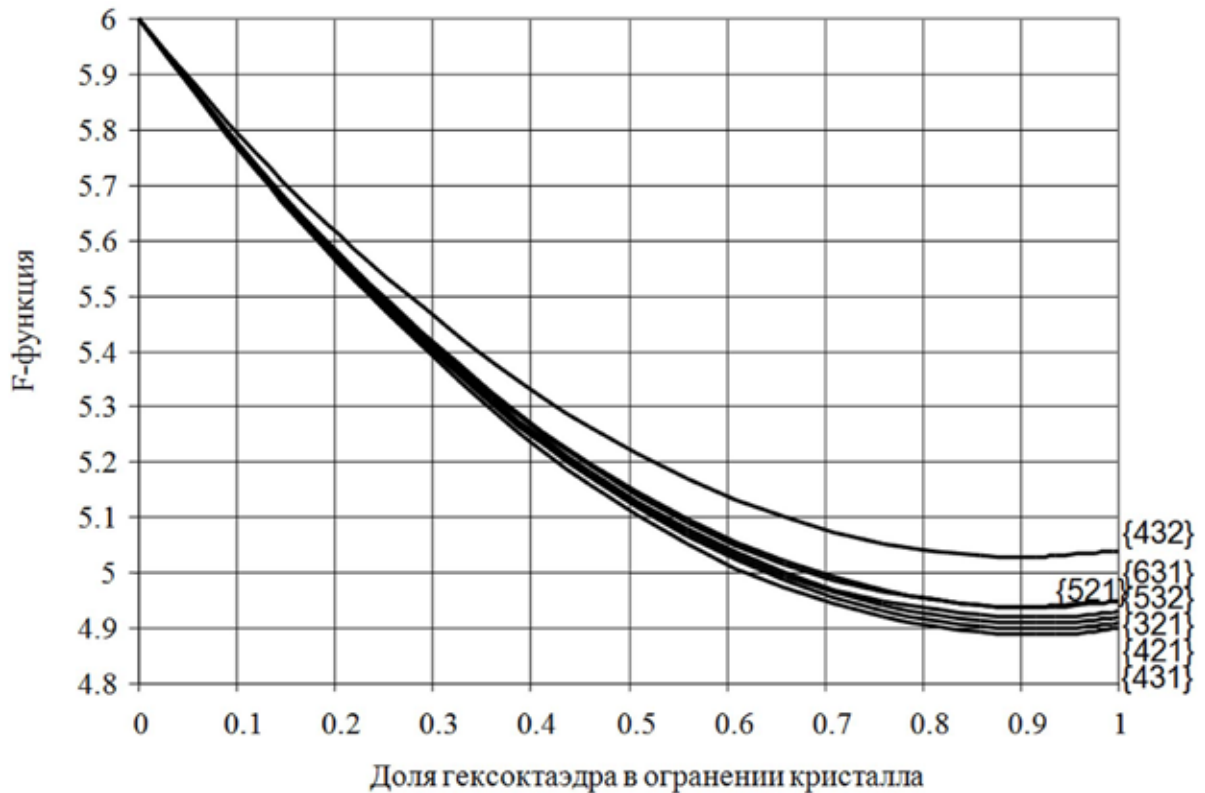


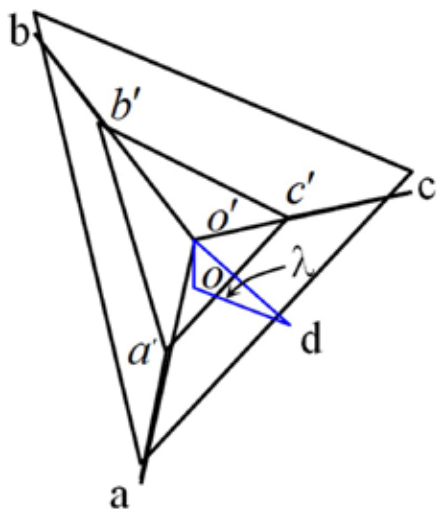
Рис. 7. Поведение F -функции для комбинаций куб – гексоктаэдр.

Комбинация октаэдр – тригонтриоктаэдр

Рассмотрим трёхгранную пирамиду, надстраиваемую над гранью abc октаэдра с длиной ребра c (рис. 8). Её вершина срезается гранью октаэдра $a'b'c'$ со стороной cx . В этом случае площадь поверхности и объём полиэдра, образованного комбинацией тригонтриоктаэдра и октаэдра, равны:

$$S = S_{\{hhl\}} - 8S_{\Delta a'b'c'} \left(\frac{1}{\cos \lambda} - 1 \right) = c^2 \left[\frac{2\sqrt{3}}{\cos \lambda} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda} - 1 \right) \right] \quad 30$$

$$V = V_{\{hhl\}} - 8V_{a'b'c'o'} = c^3 \left[0.4714 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{3} (1 - x^3) \right] \quad 31$$



Определив из (31) параметр c при условии $V = 1$ и подставив его в (30), получим F -функцию для комбинаций октаэдр – тригонтриоктаэдр:

$$F = \left[0.4714 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{3} (1 - x^3) \right]^{\frac{2}{3}} \left[\frac{2\sqrt{3}}{\cos \lambda} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda} - 1 \right) \right] \quad 32$$

В (30-32) λ -угол между гранями тригонтриоктаэдра и октаэдра.

С помощью ранее использованных приёмов приведем (32) к каноническому виду, представив приведённую поверхность полиэдра как функцию доли тригонтриоктаэдра в

Рис. 8. К выводу F -функции комбинаций октаэдр – тригонтриоктаэдр.

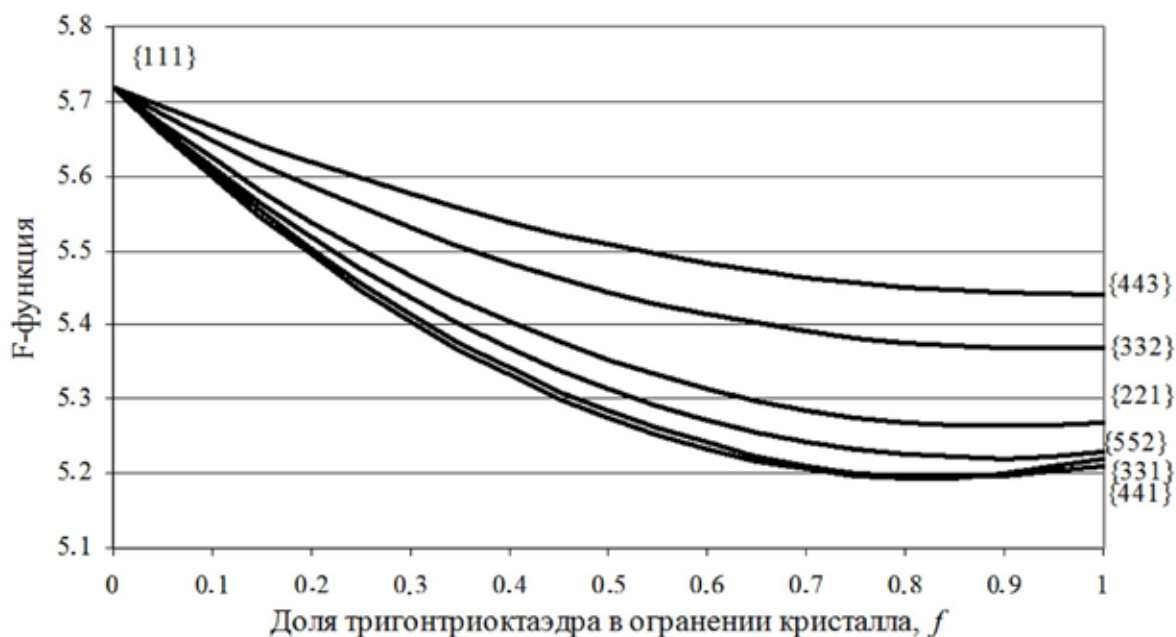


Рис. 9. Изменение F -функции для комбинаций октаэдр – тригонтриоктаэдр.

ограниении $f_{(hhl)}$. Результаты для тригонритетраэдров, наиболее часто встречающихся на кристаллах даны в табл. 6. Доля тригонтриоктаэдра в ограничении определяется из второго множителя в (32):

$$f_{(hhl)} = 1 - \frac{x^2}{1 - x^2(1 - \cos \lambda)} \quad 33$$

Таблица 6. F -функция комбинационных форм в системе октаэдр – тригонтриоктаэдр.

Комбинация октаэдра с $\{hhl\}_{h>l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры из (32, 33) при $x = 0.5$		$\lambda_{(hhl)/(111)}$	F -функция (рис. 9)
		$f_{\{hhl\}}$	$F(f_{\{hhl\}})$		
{443}	5.4418	0.99001	5.4417	7 19	$F = 0.29 f_{th}^2 - 0.57 f + 5.72$
{332}	5.3674	0.99015	5.367	10 01	$F = 0.04 f_{th}^2 - 0.75 f + 5.72$
{221}	5.2645	0.96146	5.2611	15 47	$F = 0.57 f_{th}^2 - 1.02 f + 5.72$
{552}	5.2278	0.91469	5.2197	19 28	$F = 0.64 f_{th}^2 - 1.13 f + 5.72$
{331}	5.2181	0.91602	5.2	22 00	$F = 0.73 f_{th}^2 - 1.23 f + 5.72$
{441}	5.2175	0.85296	5.1937	25 12	$F = 0.78 f_{th}^2 - 1.28 f + 5.72$

Комбинация октаэдр – тетрагонтриоктаэдр

Рассмотрим полуоктаэдр с длиной ребра c , одна вершина которого при-
тупляется четырьмя гранями тетрагонтриоктаэдра (рис. 10), каждая из кото-
рых есть равнобедренный треугольник с основанием cx . Площадь поверх-
ности и объём полиэдра равны:

$$S = S_{(111)} - 6S_{defg} \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(111)/(100)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} \right) =$$

$$c^2 \left[2\sqrt{3} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(111)/(100)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} \right) \right] \quad 34$$

$$V = V_{(111)} - 6(V_{defgb} - V_{defgi}) =$$

$$c^3 \left[\frac{\sqrt{2}}{3} - x^3 (tg \lambda_{(111)/(100)} - tg \lambda_{(hhl)/(100)}) \right] \quad 35$$

Определим из (35) параметр c при условии $V = 1$ и, подставив его в (34), получим F -функцию для комбинаций октаэдр – тетрагонтриоктаэдр при $0 \leq x \leq 0.5$.

$$F = \left[\frac{\sqrt{2}}{3} - x^3 (tg \lambda_{(111)/(100)} - tg \lambda_{(hhl)/(100)}) \right]^{-\frac{2}{3}} \left[2\sqrt{3} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(111)/(100)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} \right) \right] \quad 36$$

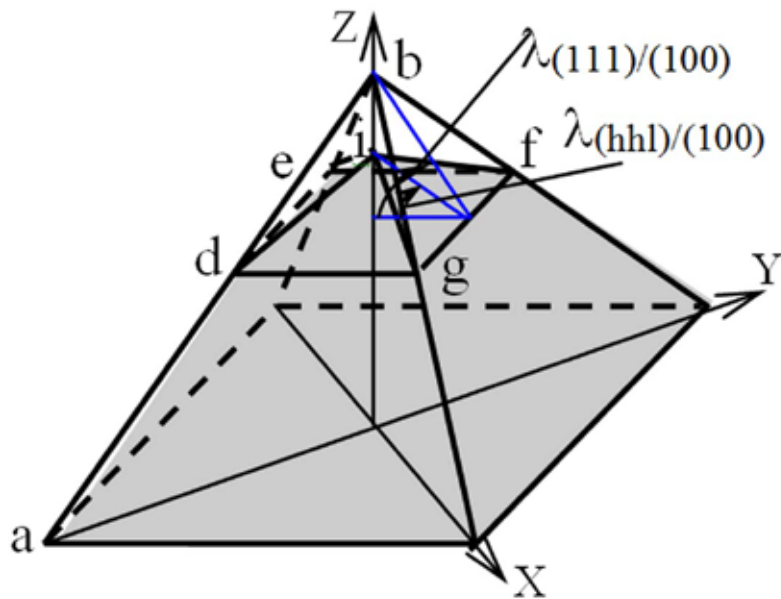


Рис. 10. К выводу F -функции комбинаций октаэдр – тетрагонтриоктаэдр.

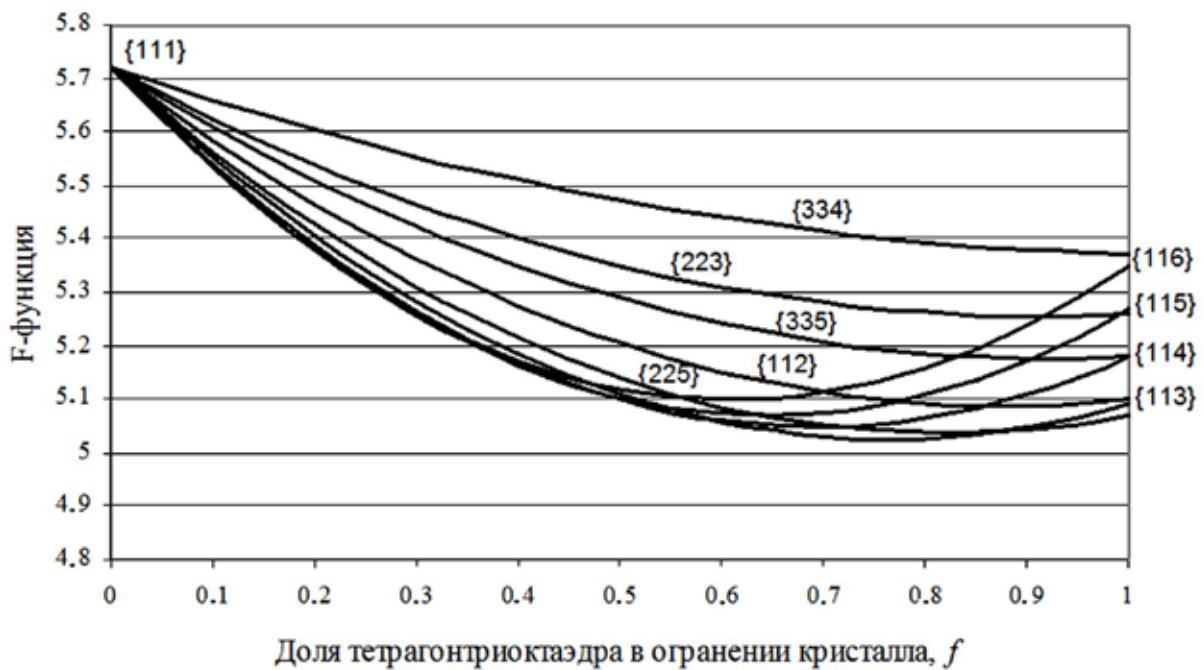


Рис. 11. Изменение F -функции для комбинаций октаэдр – тетрагонтриоктаэдр.

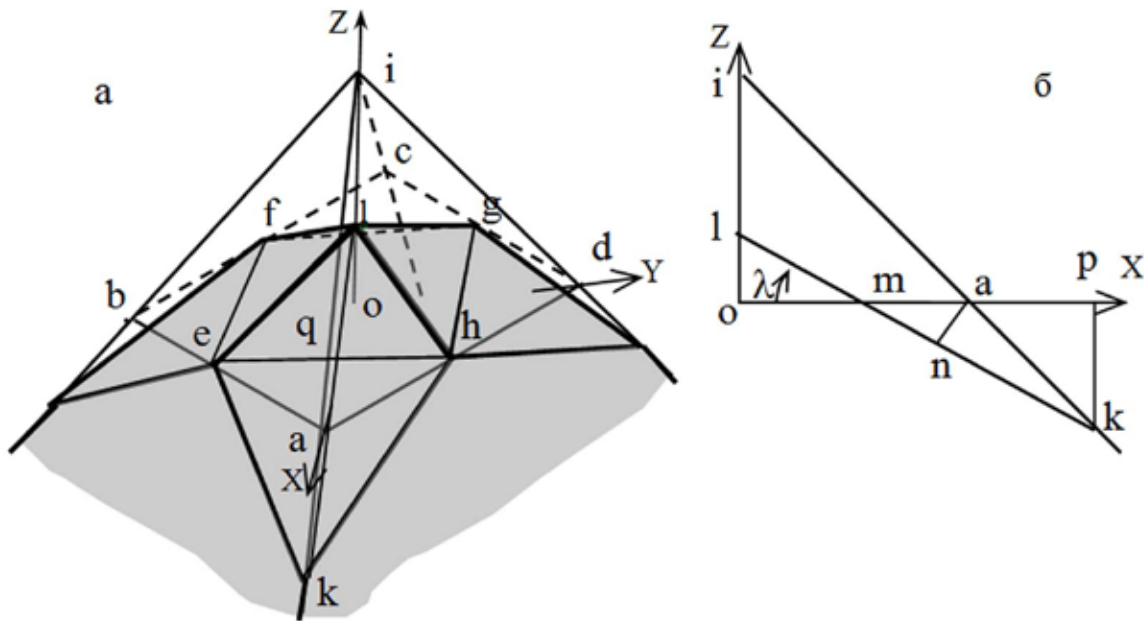
Долю тетрагонтриоктаэдра в ограничении кристалла определим из (34):

$$f_{(hhl)} = \frac{6x^2}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)} \left[2\sqrt{3} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(111)/(100)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} \right) \right]} \quad 37$$

F -функции комбинации в параболическом виде, рассчитанные с помощью (36, 37), даны в табл. 7, их графики – на рис. 11.

Таблица 7. F -функции комбинаций в системе октаэдр – тетрагонтриоктаэдр.

Комбинация октаэдра с $\{hhl\}_{h<l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры при $x = 0.5$ по (36, 37)		$\lambda_{(hhl)/(100)}$	F -функция
		$f_{\{hhl\}}$	$F(f_{\{hhl\}})$		
$\{334\}$	5.37	0.718	5.41	46 41	$F = 0.29 f_{(hhl)} - 0.64f + 5.72$
$\{223\}$	5.26	0.705	5.28	43 19	$F = 0.56 f_{(hhl)} - 1.02f + 5.72$
$\{335\}$	5.18	0.695	5.21	40 19	$F = 0.64 f_{(hhl)} - 1.18f + 5.72$
$\{112\}$	5.10	0.680	5.12	35 16	$F = 0.82 f_{(hhl)} - 1.44f + 5.72$
$\{225\}$	5.07	0.666	5.06	29 30	$F = 1.02 f_{(hhl)} - 1.67f + 5.72$
$\{113\}$	5.09	0.657	5.04	25 14	$F = 1.18 f_{(hhl)} - 1.81f + 5.72$
$\{114\}$	5.18	0.648	5.05	19 28	$F = 1.4 f_{(hhl)} - 1.94f + 5.72$
$\{115\}$	5.27	0.643	5.07	15 47	$F = 1.57 f_{(hhl)} - 2.02f + 5.72$
$\{116\}$	5.35	0.641	5.10	13 15	$F = 1.66 f_{(hhl)} - 2.03f + 5.72$

Комбинация октаэдр – тетрагексаэдрРис. 12. К выводу F -функции комбинаций октаэдр-тетрагексаэдр: а) вершина октаэдра, притупляемая гранями тетрагексаэдра; б) разрез по плоскости XoZ .

Рассмотрим вершину октаэдра с длиной ребра s , которая притупляется четырьмя гранями тетрагексаэдра, каждая из которых представляет четырехугольник с равными смежными сторонами (рис. 12а). Пусть $ai = sx$, тогда в результате притупления одной вершины поверхность октаэдра уменьшится на боковую поверхность пирамиды $abcdi$ и восемь треугольников akh . Одновременно поверхность полиэдра увеличится за счёт притупления одной вершины на четыре грани тетрагексаэдра $elkh$. В целом площадь поверхности комбинации равна:

$$S = S_{\{111\}} - 6S_{abcdi} - 48S_{\Delta akh} + 24S_{elkh} \quad 38$$

Выразим элементы из (38) через исходные параметры кристалла (рис. 12: c и cx).

$$\begin{aligned} S_{\{111\}} &= 2\sqrt{3}c^2; \quad S_{abcdi} = \frac{(ab)^2}{\cos\lambda_{\{111\}/(100)}} = \frac{c^2x^2}{\cos\lambda_{\{111\}/(100)}}; \quad S_{akh} = \frac{ak \cdot ah}{2} \sin 120^\circ = \\ &= \frac{(am) \cdot \sin\lambda_{\{h0l\}/(001)} \sqrt{3} \cdot (ah)}{4 \sin(45 - \lambda_{\{h0l\}/(001)})} = \frac{c^2x^2 \sqrt{3} \sin\lambda_{\{h0l\}/(001)}}{16\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{h0l\}/(001)})}; \quad S_{elkh} = \frac{(eh) \cdot (kl)}{2} = \frac{(eh) \cdot (oa + ap)}{2 \cos\lambda_{\{h0l\}/(001)}} = \\ &= \frac{(eh) \cdot (oa + (ak) \cos 45^\circ)}{2 \cos\lambda_{\{h0l\}/(001)}} = \frac{c^2x^2}{4 \cos\lambda_{\{h0l\}/(001)}} \left(1 + \frac{\sin\lambda_{\{h0l\}/(001)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{h0l\}/(001)})} \right) \end{aligned} \quad 39$$

Подставив (39) в (38), получим площадь поверхности комбинации октаэдра и тетрагексаэдра $\{hk0\}$:

$$S = c^2 \left\{ 2\sqrt{3} - x^2 \left[\frac{6}{\cos\lambda_{\{111\}/(100)}} + \frac{3\sqrt{3} \sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} - \frac{6}{\cos\lambda_{\{hk0\}/(100)}} \left(1 + \frac{\sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} \right) \right] \right\} \quad 40$$

Объём полиэдра равен объёму октаэдра, уменьшенному на объём 6 пирамид $abcdi$, 24 трёхгранных пирамид $ae hk$ и увеличенному на объём 6 пирамид $efghl$.

$$V = V_{\{111\}} - 6V_{abcdi} - 24V_{ae hk} + 6V_{efghl} \quad 41$$

Выразим слагаемые в (41) через параметры кристалла:

$$\begin{aligned} V_{\{111\}} &= \frac{\sqrt{2}}{3} c^3; \quad V_{abcdi} = \frac{(ab)^2 \cdot (oi)}{3} = \frac{c^3 x^3}{3\sqrt{2}}; \quad V_{ae hk} = \frac{S_{\Delta e hk} \cdot (an)}{3} = \frac{(eh) \cdot (km) \cdot (am) \sin\lambda_{\{h0l\}/(001)}}{6} = \\ &= \frac{c^3 x^3 \sqrt{2} \sin\lambda_{\{h0l\}/(001)}}{96 \sin(45 - \lambda_{\{h0l\}/(001)})}; \quad V_{efghl} = \frac{(eh)^2 (ol)}{3} = \frac{(eh)^3}{6} \operatorname{tg} \lambda_{\{h0l\}/(001)} = \frac{c^3 x^3}{12\sqrt{2}} \operatorname{tg} \lambda_{\{h0l\}/(001)} \end{aligned} \quad 42$$

Подставив (42) в (41), получим объём комбинации октаэдра и тетрагексаэдра $\{hk0\}$:

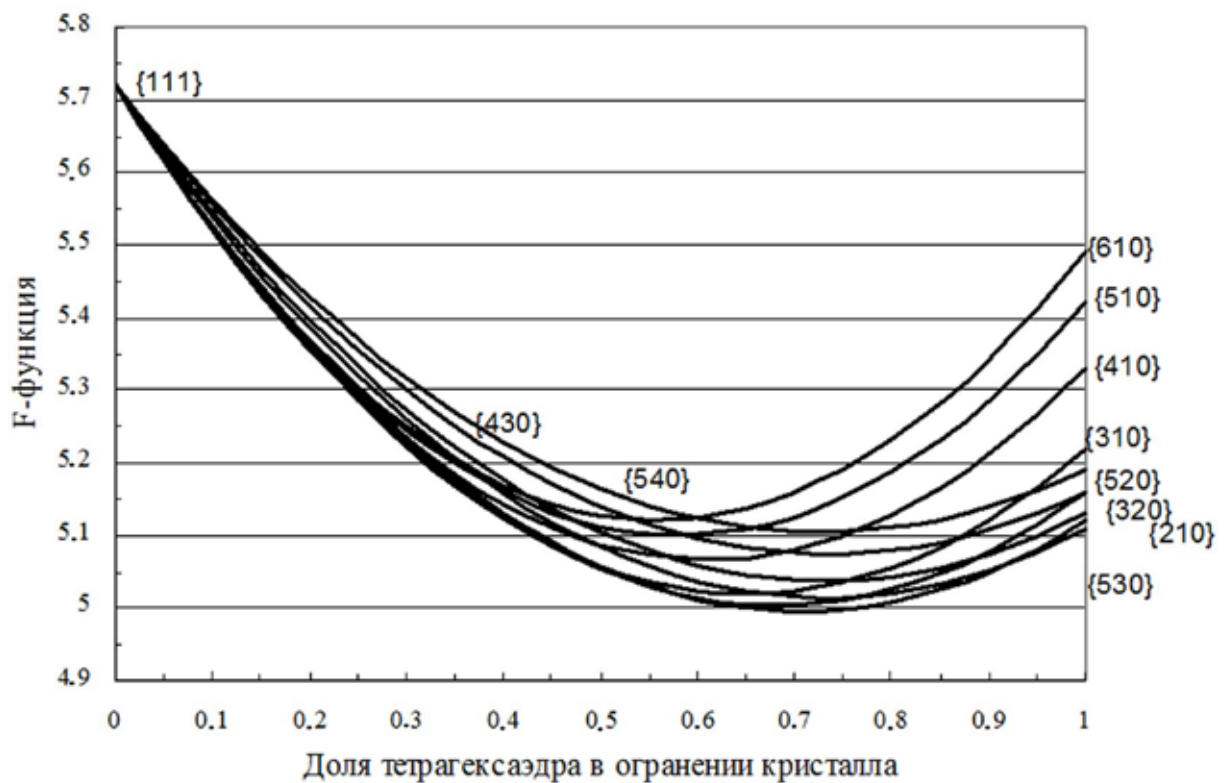
$$V = c^3 \left[\frac{\sqrt{2}}{3} - x^3 \left(\sqrt{2} + \frac{\sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{4 \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} - \frac{\operatorname{tg} \lambda_{\{hk0\}/(100)}}{2\sqrt{2}} \right) \right] \quad 43$$

Определив из (43) параметр приведения c для условия $V = 1$ и подставив его в (40), получим F-функцию для комбинаций октаэдр – тетрагексаэдр:

$$\begin{aligned} F &= \left[\frac{\sqrt{2}}{3} - x^3 \left(\sqrt{2} + \frac{\sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{4 \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} - \frac{\operatorname{tg} \lambda_{\{hk0\}/(100)}}{2\sqrt{2}} \right) \right]^{\frac{2}{3}}. \\ &\left\{ 2\sqrt{3} - x^2 \left[\frac{6}{\cos\lambda_{\{111\}/(100)}} + \frac{3\sqrt{3} \sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} - \frac{6}{\cos\lambda_{\{hk0\}/(100)}} \left(1 + \frac{\sin\lambda_{\{hk0\}/(100)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{\{hk0\}/(100)})} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad 44$$

Таблица 8. F -функции комбинаций октаэдр – тетрагексаэдр.

Комбинация октаэдра с $\{hk0\}$	$F_{(hk0)}$	Параметры по (44, 46)		$\lambda_{(hk0)/(100)}$	F -функции, $F(f_{\{hk0\}})$
		$f_{\{hk0\}}$	$F(f_{\{hk0\}})$		
$\{540\}$	5.19	0.199	5.43	38 39	$F = 1.66 f^2 - 1.69 f + 5.72$
$\{430\}$	5.16	0.237	5.37	36 52	$F = 1.2 f^2 - 1.76 f + 5.72$
$\{320\}$	5.13	0.294	5.28	33 41	$F = 1.28 f^2 - 1.87 f + 5.72$
$\{530\}$	5.11	0.337	5.22	30 58	$F = 1.32 f^2 - 1.93 f + 5.72$
$\{210\}$	5.12	0.392	5.14	26 34	$F = 1.45 f^2 - 2.05 f + 5.72$
$\{520\}$	5.16	0.445	5.09	21 48	$F = 1.54 f^2 - 2.1 f + 5.72$
$\{310\}$	5.22	0.478	5.07	18 26	$F = 1.65 f^2 - 2.15 f + 5.72$
$\{410\}$	5.33	0.519	5.08	14 02	$F = 1.75 f^2 - 2.14 f + 5.72$
$\{510\}$	5.42	0.560	5.10	11 18	$F = 1.83 f^2 - 2.13 f + 5.72$
$\{610\}$	5.49	0.557	5.12	9 27	$F = 1.91 f^2 - 2.14 f + 5.72$

Рис. 13. Изменение F -функции для комбинаций октаэдр – тетрагексаэдр.

Выражение (44) справедливо при условии:

$$x \leq \frac{0.5}{1 + \frac{\sin \lambda_{(hk0)/(100)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{(hk0)/(100)})}}$$

Долю тетрагексаэдра в ограничении определим из (40):

$$f_{(hko)} = \frac{6x^2}{\cos \lambda_{(hko)/(100)}} \left(1 + \frac{\sin \lambda_{(hko)/(100)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{(hko)/(100)})} \right) /$$

$$/ \left\{ 2\sqrt{3} - x^2 \left[\frac{6}{\cos \lambda_{(111)/(100)}} + \frac{3\sqrt{3} \sin \lambda_{(hko)/(100)}}{\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{(hko)/(100)})} - \frac{6}{\cos \lambda_{(hko)/(100)}} \left(1 + \frac{\sin \lambda_{(hko)/(100)}}{2\sqrt{2} \sin(45 - \lambda_{(hko)/(100)})} \right) \right] \right\} \quad 46$$

F -функции комбинации в параболическом виде, рассчитанные с помощью (44, 46), даны в табл. 8, их графики – на рис. 13.

Комбинация октаэдр – гексоктаэдр

F -функции этой комбинации выводятся аналогично. Результаты даны в табл. 9 и на рис. 14.

Таблица 9. F -функции комбинаций октаэдр – гексоктаэдр.

Комбинация октаэдра с $\{hkl\}$	$F_{(hkl)}$	$\lambda_{(hkl)/(111)}$	F -функции, $F(f_{\{hkl\}})$
$\{432\}$	5.04	15 14	$F = 0.87 f^2 - 1.55 f + 5.72$
$\{532\}$	4.93	20 31	$F = 0.99 f^2 - 1.78 f + 5.72$
$\{321\}$	4.92	22 13	$F = f^2 - 1.8 f + 5.72$
$\{421\}$	4.91	28 07	$F = 1.01 f^2 - 1.82 f + 5.72$
$\{431\}$	4.90	25 04	$F = 1.02 f^2 - 1.84 f + 5.72$
$\{521\}$	4.95	32 31	$F = 0.97 f^2 - 1.74 f + 5.72$
$\{531\}$	4.91	28 34	$F = 1.01 f^2 - 1.82 f + 5.72$
$\{631\}$	4.94	31 39	$F = 0.97 f^2 - 1.76 f + 5.72$

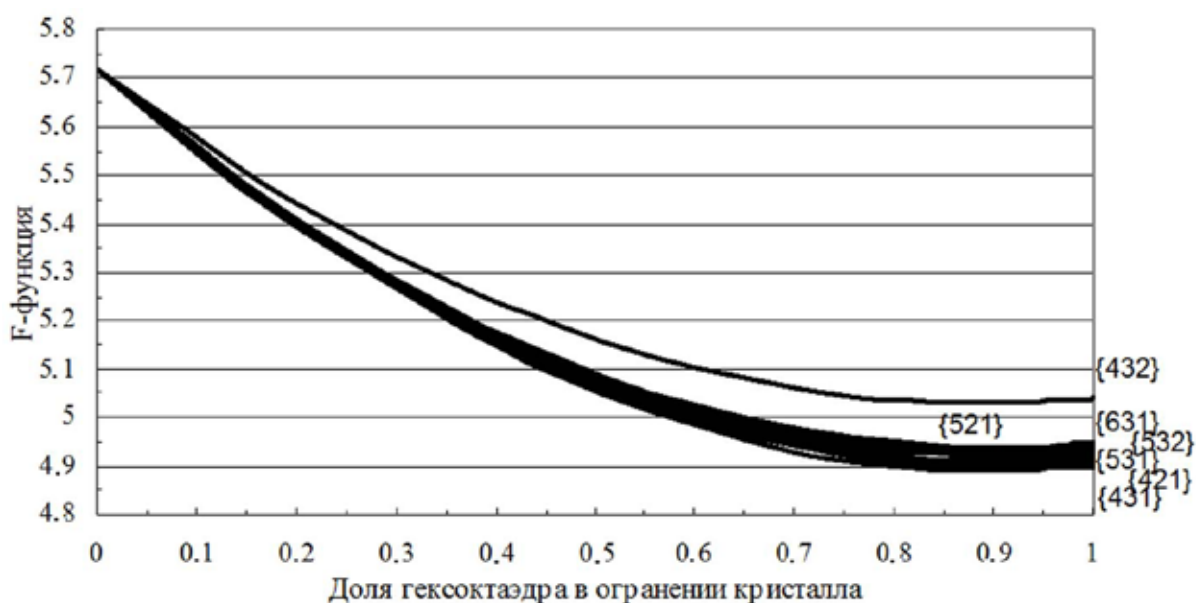


Рис. 14. Изменение F -функции для комбинаций октаэдр – гексоктаэдр.

Комбинация ромбододекаэдр – тригонтриоктаэдр

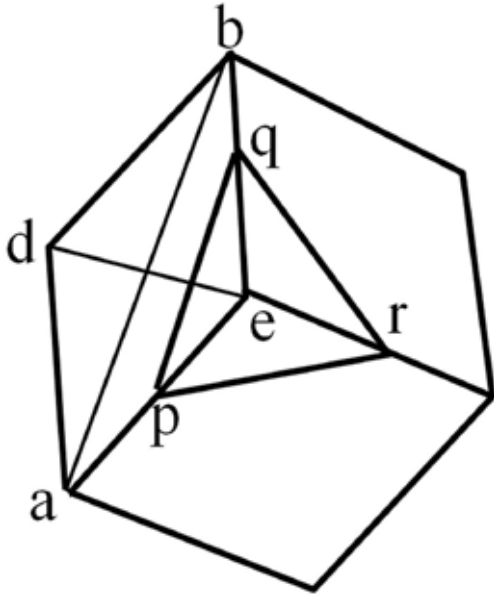


Рис. 15. Тройная вершина ромбододекаэдра, притупляемая гранями тригонтриоктаэдра.

Эта комбинация получается притуплением каждой из 8 тройных вершин ромбододекаэдра 3 гранями тригонтриоктаэдра. При этом на вершине образуется трёхгранная пирамида с основанием, соответствующим грани октаэдра (рис. 15).

Введем обозначения: $ab = c$ – длинная диагональ ромба; $pq = cx$ – сторона основания пирамиды, образующейся в результате притупления вершин тригонтриоктаэдра; x – доля длины большой диагонали ромба. Площадь поверхности комбинационного полиэдра равна площади поверхности ромбододекаэдра $S_{\{110\}}$, уменьшенной на площадь боковой поверхности M_1 8 пирамид, образующихся при срезании вершин ромбододекаэдра гранью октаэдра и увеличенной на площадь боковой поверхности M_2 8 пирамид, надстраиваемых гранями тригонтриоктаэдра на гранях октаэдра:

$$S = S_{\{110\}} - 8M_1 + 8M_2 = S_{\{110\}} - 8S_{\Delta pqr} \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(110)/(111)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \quad 47$$

Объём комбинационного полиэдра равен объёму ромбододекаэдра $V_{\{110\}}$ уменьшенному на объём V_1 8 пирамид, образующихся при срезании вершин ромбододекаэдра гранью октаэдра и увеличенному на объём V_2 8 пирамид, надстраиваемых гранями тригонтриоктаэдра на гранях октаэдра:

$$V = V_{\{110\}} - 8V_1 + 8V_2 = V_{\{110\}} - \frac{8S_{\Delta pqr}}{3}(h_1 - h_2) \quad 48$$

Выразим элементы из (47, 48) через параметры полиэдра:

$$S_{\{110\}} = 12S_{adbe} = 12 \frac{1}{2} ab \cdot de = \frac{6c^2}{\sqrt{2}}; \quad V_{\{110\}} = \frac{1}{3} S_{\{110\}} \frac{ab}{2} = \frac{c^3}{\sqrt{2}}; \quad S_{\Delta pqr} = \frac{\sqrt{3}}{4} c^2 x^2; \quad 49$$

$$h_1 = pq \cdot \sin 60^\circ \frac{\operatorname{tg} \lambda_{(110)/(111)}}{3} cx = \frac{\sqrt{3} \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(111)}}{6} cx; \quad h_2 = \frac{\sqrt{3} \operatorname{tg} \lambda_{(hhl)/(111)}}{6} cx$$

Подставив соответствующие выражения из (49) в (47) и (48), определим площадь поверхности и объём комбинационного полиэдра.

$$S = c^2 \left[\frac{6}{\sqrt{2}} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(110)/(111)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right] \quad 50$$

$$V = c^3 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{x^3}{3} (tg \lambda_{(110)/(111)} - tg \lambda_{(hhl)/(111)}) \right] \quad 51$$

Из (51) определим параметр приведения c для условия $V = 1$ и, подставив его в (50), получим F -функцию для комбинаций ромбододекаэдр – тригонтриоктаэдр:

$$F = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{x^3}{3} (tg \lambda_{(110)/(111)} - tg \lambda_{(hhl)/(111)}) \right]^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{6}{\sqrt{2}} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(110)/(111)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right] \quad 52$$

Из (50) определим долю тригонтриоктаэдра в огранении:

$$f = \frac{2\sqrt{3}x^2}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} / \left[\frac{6}{\sqrt{2}} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(110)/(111)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right] \quad 53$$

Определив F и f при трёх значениях x , представим F -функцию в параболической форме как функцию доли тригонтриоктаэдра в огранении кристалла. Результаты даны в табл. 10 и на рис. 16.

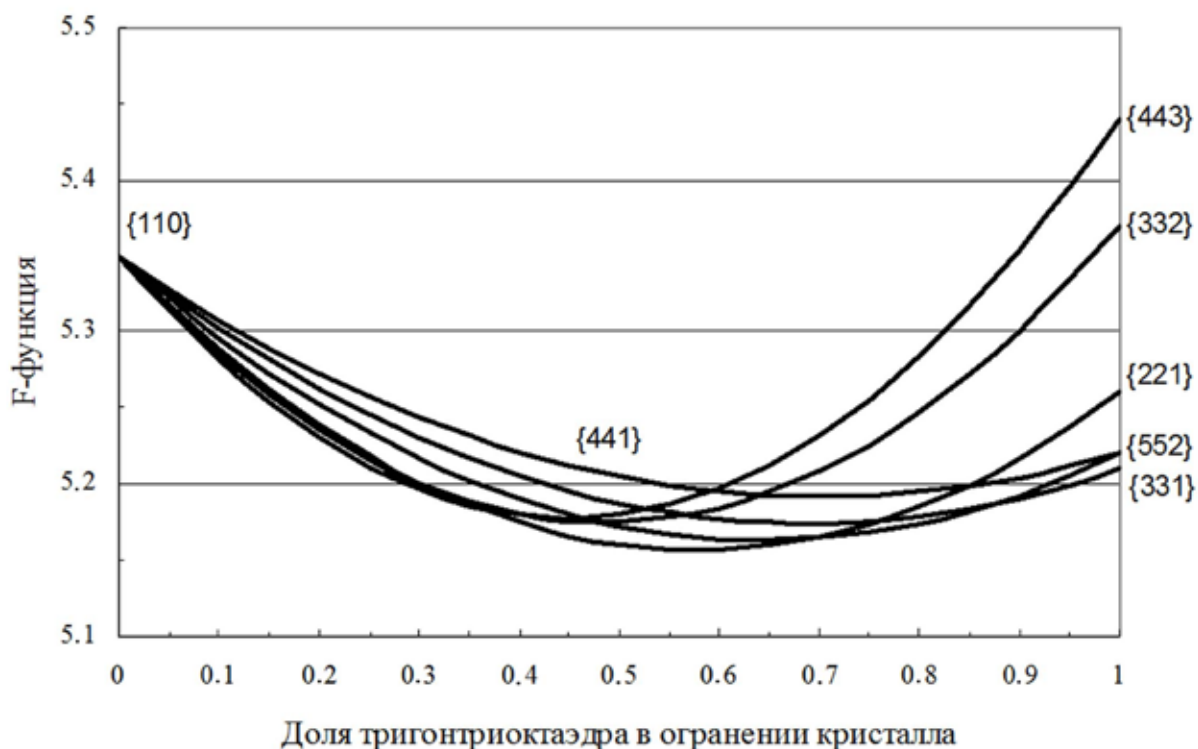


Рис. 16. Изменение F -функции для комбинаций ромбододекаэдр – тригонтриоктаэдр.

Таблица 10. F -функции комбинаций ромбододекаэдр – тригонтриоктаэдр.

Комбинация октаэдра с $\{hhl\}_{h>l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры по (52, 53)		$\lambda_{(hhl)/(110)}$	F -функции, $F(f_{\{hhl\}})$
		$f_{\{hhl\}}$	$f_{\{hhl\}}$		
{443}	5.44	0.255	5.21	7 19	$F = 0.5 f^2 - 0.25 f + 5.72$
{332}	5.37	0.300	5.2	10 01	$F = 0.66 f^2 - 0.32 f + 5.72$
{221}	5.26	0.353	5.186	15 47	$F = 0.58 f^2 - 0.67 f + 5.72$
{552}	5.23	0.411	5.187	19 28	$F = 0.45 f^2 - 0.58 f + 5.35$
{331}	5.21	0.472	5.193	22 00	$F = 0.37 f^2 - 0.51 f + 5.35$
{441}	5.22	0.475	5.21	25 12	$F = 0.32 f^2 - 0.45 f + 5.35$

Комбинация ромбододекаэдр – тетрагонтриоктаэдр

Переход от ромбододекаэдра к его комбинации с тетрагонтриоктаэдром можно представить в виде срезания рёбер ромбододекаэдра гранями тетрагонтриоктаэдра. Зададимся исходными параметрами получающегося полиэдра: $ab = c$ – длина ребра ромбододекаэдра; $ae = cx$ – ширина полосы поверхности грани (110), срезаемой гранью $(hhl)_{h<l}$. Определим производные параметры кристалла. Из геометрических отношений элементов куба и вписанных в него граней ромбододекаэдра (рис. 17а) следует: $bk = 2cx$; малая и большая диагонали исходного ромба равны $d_1 = 2c/\sqrt{3}$; $d_2 = 2\sqrt{2}c/\sqrt{3}$. Малая и большая диагонали уменьшающегося ромба определяются с помощью рис. 17б.

$$F = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{x^3}{3} (tg \lambda_{(110)/(111)} - tg \lambda_{(hhl)/(111)}) \right]^{\frac{2}{3}} \left[\frac{6}{\sqrt{2}} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(110)/(111)}} - \frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right]$$

Далее определим площадь остаточной поверхности ромбододекаэдра:

$$S_{\{110\}} = 12S_{fghi} = 12 \frac{d_1^1 d_2^1}{2} = 6 \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}} (1-2x)^2 c^2 = 8\sqrt{2}(1-2x)^2 c^2 \quad 54$$

Объём пирамид нарастания граней ромбододекаэдра равен:

$$V_{\{110\}}^i = \frac{1}{3} S_{\{110\}} n_{(110)} = \frac{8\sqrt{2}}{3} (1-2x)^2 c^2 \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} c = c^3 \frac{16}{3\sqrt{3}} (1-2x)^2 \quad 55$$

Каждая грань тетрагонтриоктаэдра, образуемая срезанием ребра ромбододекаэдра, состоит из 3 фигур: 2 равнобедренных треугольников с одной равной стороной, по которой при $x = 0.5$ они смыкаются, образуя обычную для тетрагонтриоктаэдра клиновидную 4-угольную грань. При $0 < x < 0.5$ треугольники разъединены прямоугольником, сторона fg которого равна $(1-2x)c$, другая – ширине грани тетрагонтриоктаэдра m :

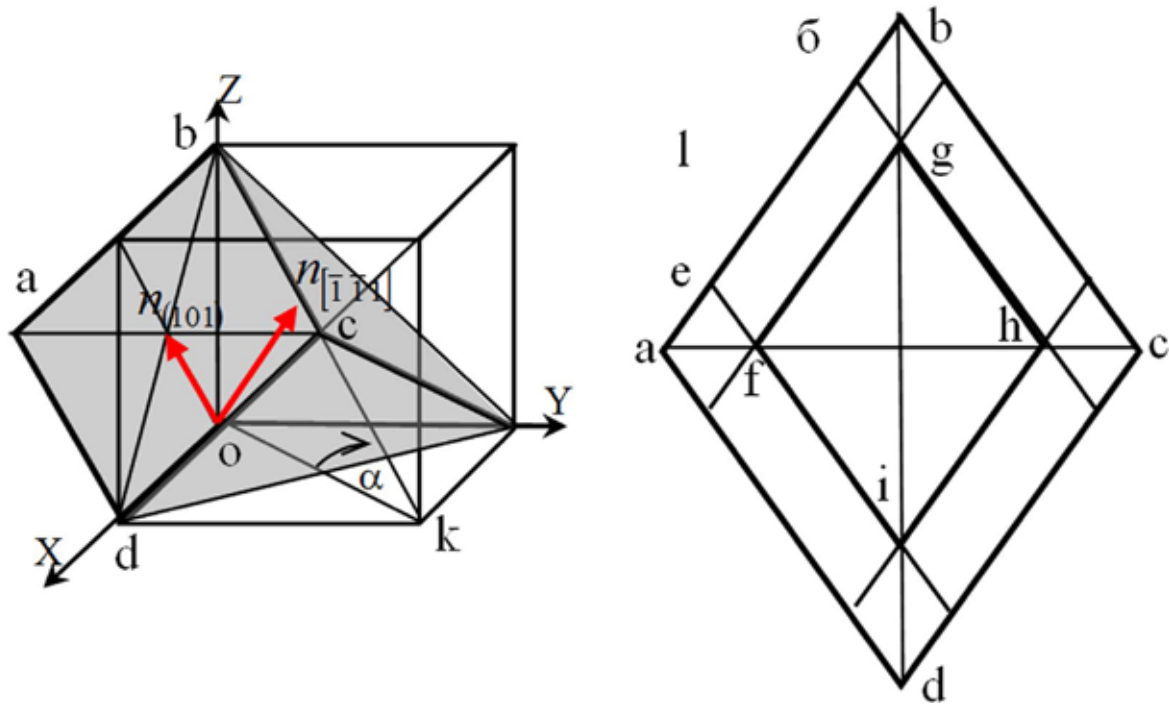


Рис. 17. Грани ромбододекаэдра в первом октанте (а); уменьшение поверхности грани ромбододекаэдра за счёт развития граней тетрагонтриоктаэдра (б).

$$m = pq = rs = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}cx \quad 56$$

Определим площади элементов, составляющих грань (211). Площадь прямоугольной части S_1 равна:

$$S_1 = fg \cdot m = c^2(1 - 2x)x1.63x \quad 57$$

Площадь S_2 треугольника, образующего вместе с 3 равными ему треугольниками четверную вершину b тетрагонтриоктаэдра (рис. 18а), равна:

$$S_2 = \frac{S_{\Delta bpq}}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} = \frac{(pq)^2}{4\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} = \frac{m^2}{4\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} = c^2 \frac{2x^2}{3\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} \quad 58$$

Площадь S_3 треугольника, образующего вместе с 2 равными ему треугольниками тройную вершину a тетрагонтриоктаэдра (рис. 18б), равна:

$$S_3 = \frac{S_{\Delta srt}}{3\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} = \frac{\sqrt{3}(rs)^2}{12\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \frac{\sqrt{3}m^2}{12\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} = c^2 \frac{2x^2}{3\sqrt{3}\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \quad 59$$

Просуммировав (57-59) и умножив сумму на 24, получим площадь грани тетрагонтриоктаэдра:

$$S_{(hhl)} = 24c^2 \left[(1 - 2x)x1.63 + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3}\cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right] \quad 60$$

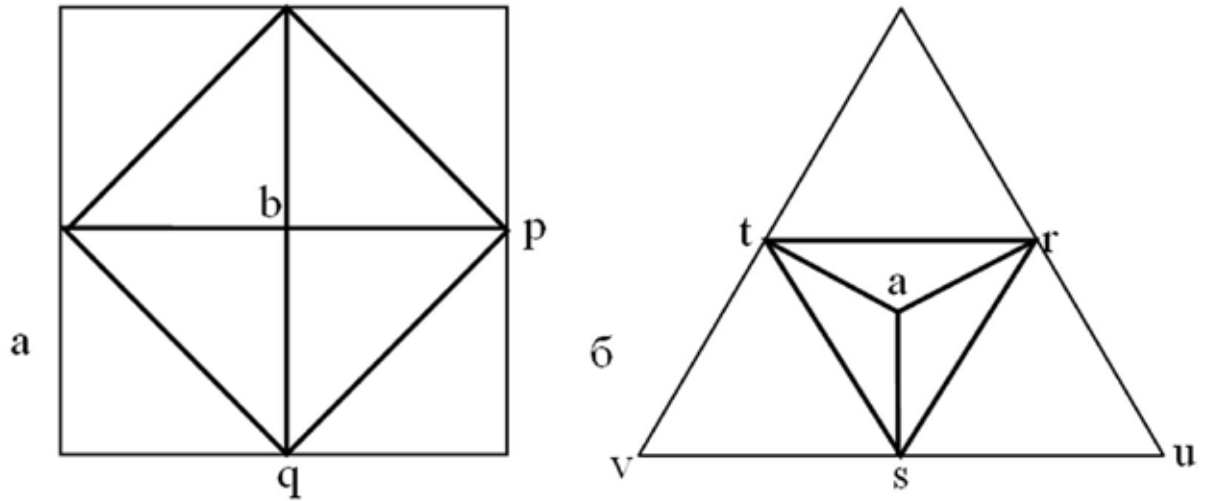


Рис. 18. Проекции вершин тетрагонтриоктаэдра: а) четверной на (001); б) тройной на (111).

Для определения объёма пирамид нарастания граней тетрагонтриоктаэдра, нормаль к ним $n_{(hhl)}$ выразим через параметры кристалла (рис. 17а):

$$n_{(hhl)} = n_{[\bar{1}\bar{1}1]} - \frac{m}{2} \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)} = \left[ok \cdot \sin \alpha - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} x \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)} \right] = c \left(\frac{2\sqrt{2}}{3} - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} x \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)} \right) \quad 61$$

Объём пирамид граней $\{hhl\}$ равен:

$$V_{\{hhl\}} = \frac{8}{3} S_{\{hhl\}} n_{(hhl)} = 8c^3 \left[1.63x(1-2x) + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{\{hhl\}/(111)}} \right) \right] (0.943 - 0.816 x \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)}) \quad 62$$

Площадь поверхности и объём комбинации равны сумме (54) + (60) и (55) + (62):

$$S_{\{hhl\}} = c^2 \left\{ 8\sqrt{2}(1-2x)^2 + 24 \left[(1-2x)x1.63 + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{\{hhl\}/(111)}} \right) \right] \right\} \quad 63$$

$$V = c^3 \left\{ 3.08(1-2x)^2 + 8 \left[1.63x(1-2x) + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{\{hhl\}/(111)}} \right) \right] (0.943 - 0.816 x \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)}) \right\} \quad 64$$

Определив из (64) параметр c при условии $V = 1$ и подставив его в (63), получим F -функцию для рассматриваемой комбинации:

$$F = \left\{ 3.08(1-2x)^2 + 8 \left[1.63x(1-2x) + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{\{hhl\}/(111)}} \right) \right] (0.943 - 0.816 x \operatorname{tg} \lambda_{(110)/(hhl)}) \right\}^{\frac{2}{3}} \cdot \left\{ 8\sqrt{2}(1-2x)^2 + 24 \left[(1-2x)x1.63 + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{\{hhl\}/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{\{hhl\}/(111)}} \right) \right] \right\} \quad 65$$

Долю тетрагонтриоктаэдра в ограничении определим из (63):

$$f_{(hhl)} = \frac{3 \left[1.63x(1-2x) + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} + \frac{1}{\lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right]}{\sqrt{2}(1-2x)^2 + 3 \left[1.63x(1-2x) + 0.667x^2 \left(\frac{1}{\cos \lambda_{(hhl)/(100)}} + \frac{1}{\sqrt{3} \cos \lambda_{(hhl)/(111)}} \right) \right]} \quad 66$$

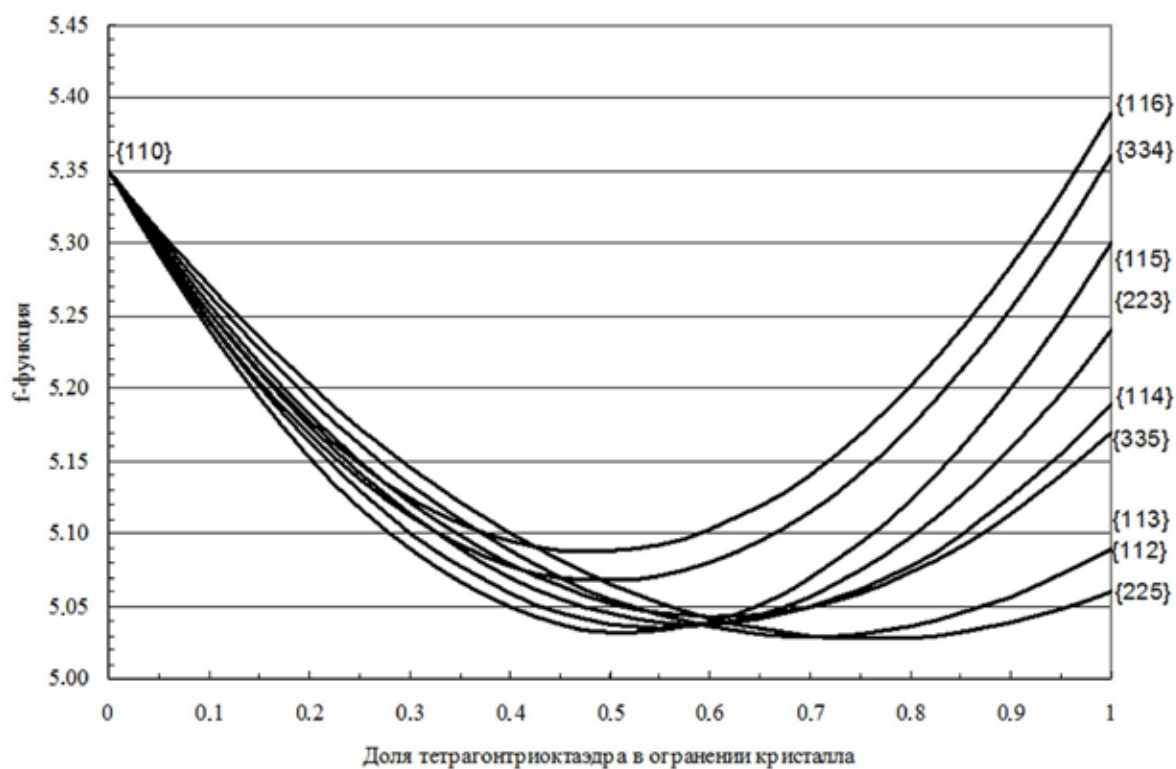


Рис. 19. Изменение F -функции для комбинаций ромбододекаэдр – тетрагонтриоктаэдр.

Таблица 11. F -функция комбинаций ромбододекаэдр – тетрагонтриоктаэдр.

Комбинация ромбододекаэдра с $\{hhl_{h<1}\}$	$F_{(hhl)}$	Параметры по (65, 66)		$\lambda_{(hhl)/(110)}$	F -функции
		$f_{\{hhl\}}$	$f_{\{hhl\}}$		
{334}	5.36	0.596	5.08	31 55	$F = 1.14 f_{(hhl)} - 1.14 f + 5.35$
{223}	5.24	0.708	5.06	30 58	$F = 1.03 f_{(hhl)} - 1.14 f + 5.35$
{335}	5.17	0.706	5.05	30 23	$F = 0.83 f_{(hhl)} - 1.01 f + 5.35$
{112}	5.09	0.704	5.03	30 00	$F = 0.66 f_{(hhl)} - 0.92 f + 5.35$
{225}	5.06	0.702	5.03	30 30	$F = 0.56 f_{(hhl)} - 0.85 f + 5.35$
{113}	5.09	0.702	5.03	31 29	$F = 0.66 f_{(hhl)} - 0.92 f + 5.35$
{114}	5.19	0.702	5.05	33 33	$F = 0.9 f_{(hhl)} - 1.06 f + 5.35$
{115}	5.3	0.702	5.07	35 16	$F = 1.17 f_{(hhl)} - 1.22 f + 5.35$
{116}	5.39	0.590	5.1	36 35	$F = 1.13 f_{(hhl)} - 1.09 f + 5.35$

С помощью (65) и (66) F -функцию для комбинаций ромбододекаэдр – тетрагонтриоктаэдр, распространенных на реальных кристаллах, приведём к параболическому виду, выразив через $f_{\{hkl\}}$. Результаты сведены в табл. 11 и на рис. 19.

Для оставшихся комбинаций голоэдрического класса ромбододекаэдр – тетрагексаэдр и ромбододекаэдр – гексоктаэдр, редко встречаемых в царстве минералов, приведём основные F -функции, опустив их вывод.

Комбинация ромбододекаэдр – тетрагексаэдр

Эта комбинация получается притуплением 6 четверных вершин ромбододекаэдра гранями тетрагексаэдра. F -функция для комбинаций ромбододекаэдр-тетрагексаэдр $\{hk0\}$ описывается выражением:

$$F = \left[V_{\{110\}} - x^3 (tg\lambda_{\{110\}/\{100\}} - tg\lambda_{\{hk0\}/\{100\}}) \right]^{\frac{2}{3}} \left[S_{\{110\}} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{\{110\}/\{100\}}} - \frac{1}{\cos\lambda_{\{hk0\}/\{100\}}} \right) \right] =$$

$$= \left[3.08 - x^3 (tg\lambda_{\{110\}/\{100\}} - tg\lambda_{\{hk0\}/\{100\}}) \right]^{\frac{2}{3}} \left[8\sqrt{2} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{\{110\}/\{100\}}} - \frac{1}{\cos\lambda_{\{hk0\}/\{100\}}} \right) \right]. \quad 67$$

В качестве параметра приведения при выводе (67) принята малая диагональ ромба c , sx – сторона грани куба, образующейся при срезании вершин ромбододекаэдра гранями тетрагексаэдра. Доля тетрагексаэдра в огранении равна:

$$f_{\{hk0\}} = \frac{6x^2}{8\sqrt{2}\cos\lambda_{\{hk0\}/\{100\}} - 6x^2 \left(\frac{\cos\lambda_{\{hk0\}/\{100\}}}{\cos\lambda_{\{110\}/\{100\}}} - 1 \right)} \quad 68$$

F -функции в параболической форме даны в табл. 12, графики – на рис. 20.

Таблица 12. F -функция комбинаций ромбододекаэдр – тетрагексаэдр.

Комбинация ромбододекаэдра с $\{hk0\}$	$F_{\{hk0\}}$	Параметры по (67, 68)		$\lambda_{\{hk0\}/\{110\}}$	F -функции, $F(f_{\{hk0\}})$
		$f_{\{hk0\}}$	$f_{\{hk0\}}$		
$\{540\}$	5.19	0.894	5.19	6 20	$F = 0.18f^2 - 0.34f + 5.35$
$\{430\}$	5.16	0.891	5.16	8 08	$F = 0.21f^2 - 0.4f + 5.35$
$\{320\}$	5.13	0.784	5.12	11 18	$F = 0.34f^2 - 0.56f + 5.35$
$\{530\}$	5.11	0.779	5.09	14 02	$F = 0.47f^2 - 0.7f + 5.35$
$\{210\}$	5.12	0.673	5.07	18 26	$F = 0.57f^2 - 0.8f + 5.35$
$\{520\}$	5.16	0.575	5.06	23 12	$F = 0.74f^2 - 0.93f + 5.35$
$\{310\}$	5.22	0.489	5.06	26 34	$F = 0.91f^2 - 1.04f + 5.35$
$\{410\}$	5.33	0.412	5.08	30 58	$F = 1.08f^2 - 1.1f + 5.35$
$\{510\}$	5.42	0.409	5.09	33 42	$F = 1.18f^2 - 1.12f + 5.35$
$\{610\}$	5.49	0.408	5.1	35 32	$F = 1.27f^2 - 1.13f + 5.35$

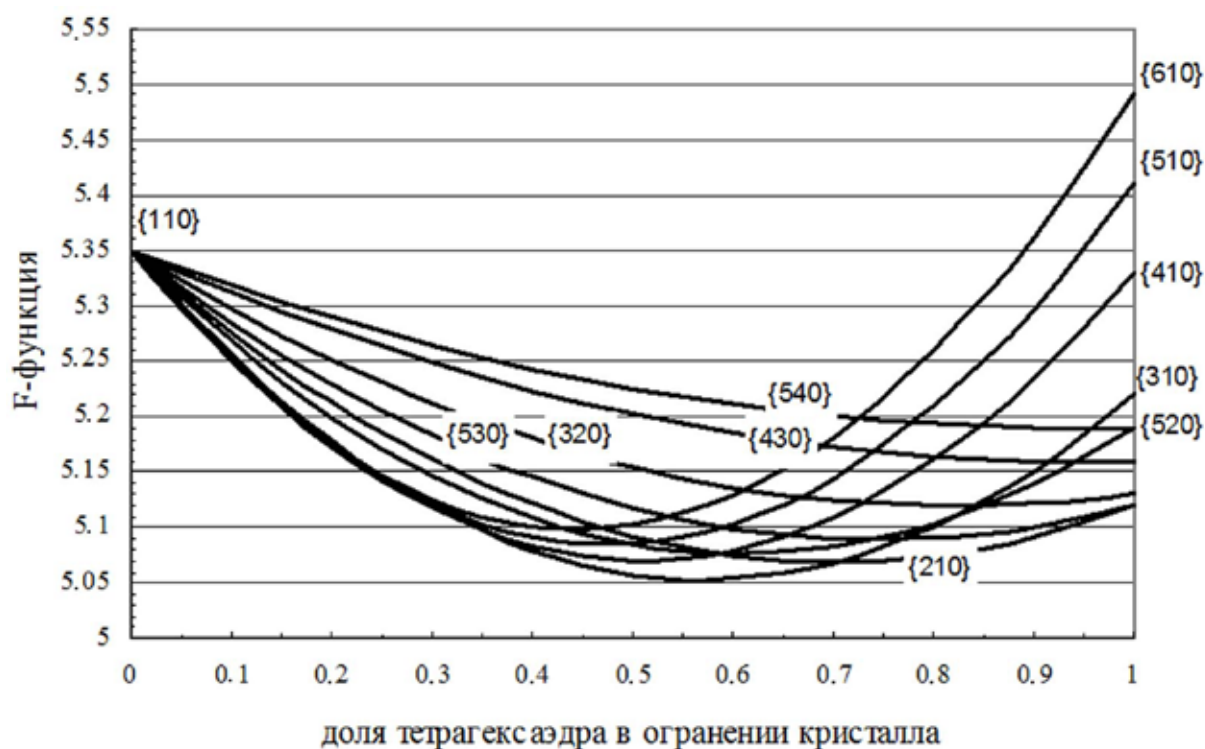


Рис. 20. Изменение F -функции для комбинаций ромбододекаэдр – тетрагексаэдр.

Комбинация ромбододекаэдр – гексоктаэдр

Ввиду сложности геометрического вывода F -функции используем приближённый аналитический метод для вывода частных формул. Исходные данные: F -функции разных гексоктаэдров; минимальное значение F -функции для всех комбинаций рассчитано по формуле $F(60) = 4.84 + 1.28/60 + 82.08/60^2 - 288/60^3 = 4.88$ и приписано комбинации ромбододекаэдра с гексоктаэдром $\{431\}$, F -функция которого минимальна (4.9) среди других гексоктаэдров; минимальные значения F -функции для комбинации ромбододекаэдра с другими гексоктаэдрами рассчитаны по формуле $\min F_{(110)/(hkl)} = F_{(hkl)} 4.88/4.9$. Рассчитанные по этим данным параболические F -функции для двойных комбинаций ромбододекаэдра с реально встречаемыми гексоктаэдрами даны в табл. 13, графики – на рис. 21.

Таблица 13. F -функции комбинаций ромбододекаэдр – гексоктаэдр.

Комбинация ромбододекаэдра с $\{hkl\}$	$F_{(hkl)}$	$\lambda_{(hkl)/(110)}$	F -функции, $F(f_{\{hkl\}})$
$\{432\}$	5.04	23 12	$F = 0.51 f^2 - 0.82 f + 5.35$
$\{321\}$	4.92	19 06	$F = 0.67 f^2 - 1.1 f + 5.35$
$\{431\}$	4.9	13 54	$F = 0.68 f^2 - 1.13 f + 5.35$
$\{531\}$	4.91	17 01	$F = 0.67 f^2 - 1.11 f + 5.35$
$\{521\}$	4.95	25 21	$F = 0.62 f^2 - 1.02 f + 5.35$

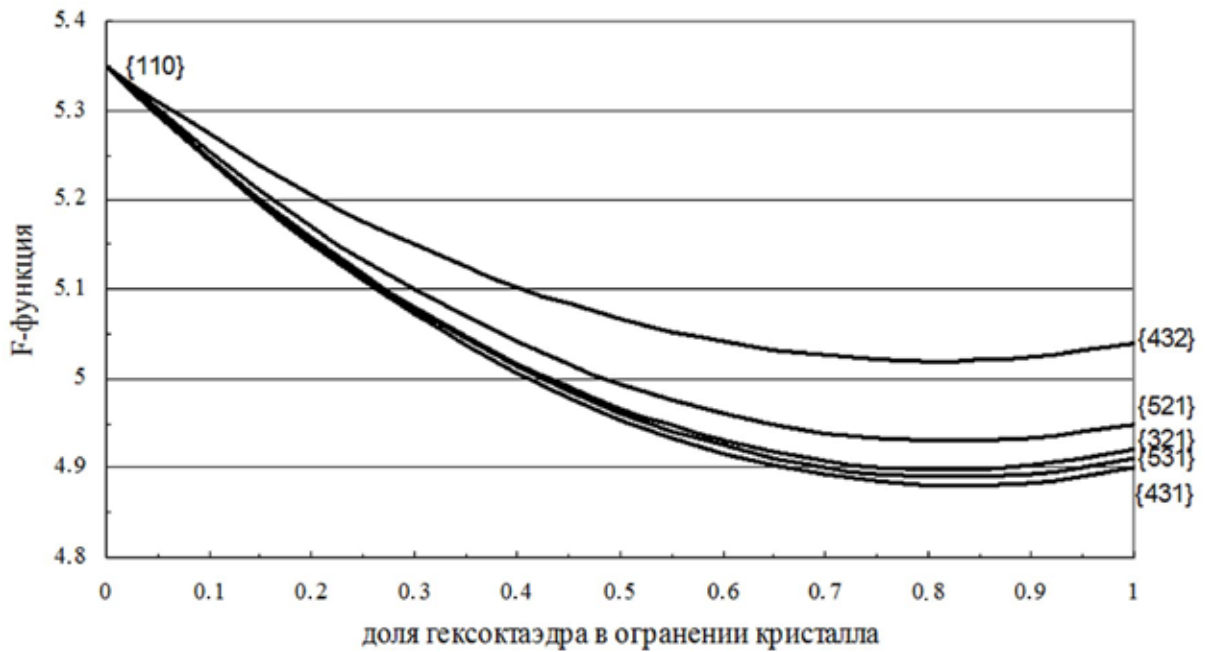


Рис. 21. Изменения F -функции для комбинаций ромбододекаэдр – гексоктаэдр.

На этом мы закончили рассмотрение двойных комбинаций «постоянная форма – переменная форма» в голоэдрическом классе кубической сингонии. Из двойных комбинаций, возможных в других классах этой сингонии, рассмотрим лишь те, которые чаще других встречаются в огранении кристаллов. К ним относятся комбинации куб – пентагондодокаэдр, октаэдр – пентагондодокаэдр, тетраэдр – тригонритетраэдр, тетраэдр – тетрагонритетраэдр.

Комбинация куб – пентагондодокаэдр

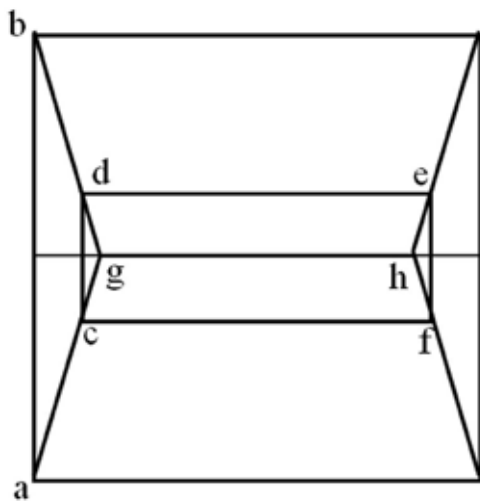


Рис. 22. Проекция «крыши» пентагондодокаэдра на грань куба.

Исходные данные (рис. 22): базовая форма – пентагондодокаэдр, длинные рёбра которого срезаются гранями куба; $ab = c$ – длина большой диагонали грани пентагондодокаэдра или ребра куба, вписанного в пентагондодокаэдр; $cd = cx$ – малая сторона образующейся при срезании прямоугольной грани куба; $0 \leq x \leq 1$.

Воспользуемся F -функцией пентагондодокаэдра, выведенной ранее при заданном параметре приведения, равном длине ребра куба, вписанного в пентагондодокаэдр:

$$F = 3 \left[1 + \frac{\operatorname{tg} \lambda}{2} (3 - \operatorname{tg}^2 \lambda) \right]^{-\frac{2}{3}} \left(\frac{2 - \operatorname{tg}^2 \lambda}{\operatorname{Cos} \lambda} + \frac{\operatorname{Sin} \lambda}{\operatorname{Cos}^2 \lambda} \right)$$

69

где λ – угол между гранями куба и пентагондодокаэдра. Для вывода

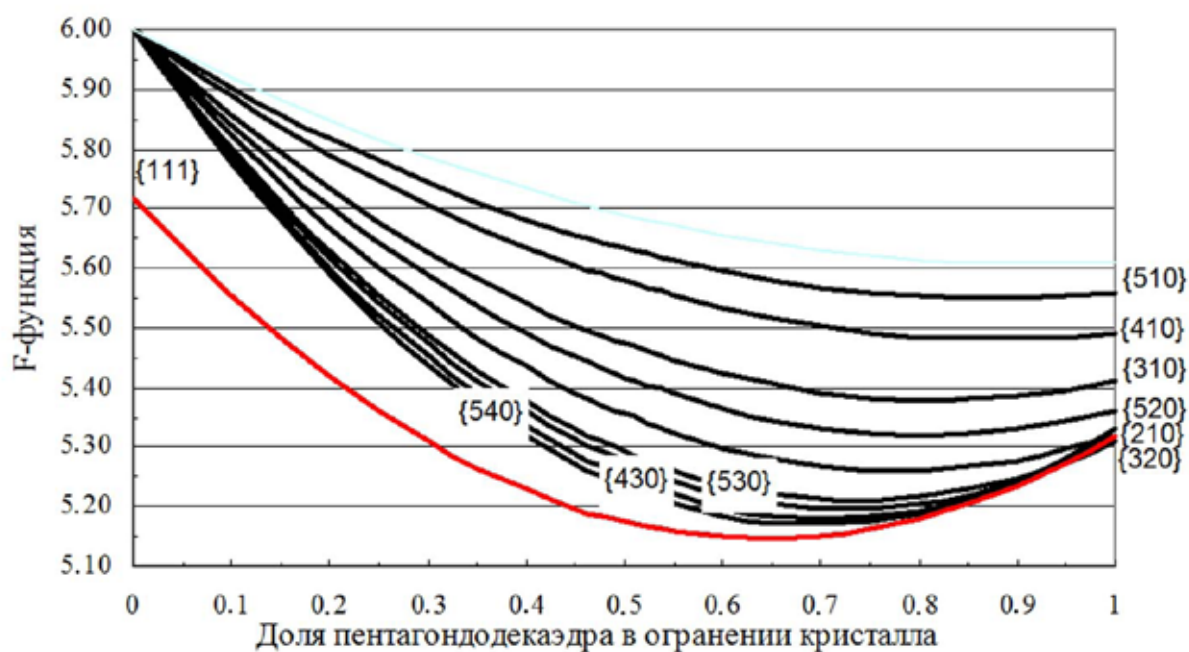


Рис. 23. Изменения F -функции для комбинаций куб – пентагондодекаэдр, октаэдр – пентагондодекаэдр $\{210\}$ (красная кривая).

Таблица 14. F -функция комбинаций куб – пентагондодекаэдр.

Комбинация куба с $\{h k 0\}$	$F_{(h k 0)}$	Параметры по (70, 71)		$\lambda_{(h k 0)/(100)}$	F -функции, $F(f_{\{h k 0\}})$
		$f_{\{h k 0\}}$	$F(f_{\{h k 0\}})$		
$\{540\}$	5,33	0.685	5.17	38 39	$F = 1.72 f^2 - 2.39 f + 6$
$\{430\}$	5.36	0.712	5.18	36 52	$F = 1.64 f^2 - 2.32 f + 6$
$\{320\}$	5.31	0.682	5.2	33 41	$F = 1.52 f^2 - 2.21 f + 6$
$\{530\}$	5.31	0.733	5.21	30 58	$F = 1.45 f^2 - 2.14 f + 6$
$\{210\}$	5.32	0.757	5.26	26 34	$F = 1.22 f^2 - 1.90 f + 6$
$\{520\}$	5.36	0.814	5.32	21 48	$F = 1.05 f^2 - 1.69 f + 6$
$\{310\}$	5.41	0.848	5.38	18 26	$F = 0.93 f^2 - 1.52 f + 6$
$\{410\}$	5.49	0.873	5.48	14 02	$F = 0.67 f^2 - 1.18 f + 6$
$\{510\}$	5.56	0.868	5.55	11 18	$F = 0.59 f^2 - 1.03 f + 6$
$\{610\}$	5.613	0.910	5.61	9 27	$F = 0.46 f^2 - 0.85 f + 6$

F -функции комбинаций куб – пентагондодекаэдр достаточно в (69) первый множитель уменьшить на объём срезаемых 6 тел $cdefgh$, каждое из которых имеет форму клина, а второй множитель уменьшить на площадь боковой поверхности этих клиньев и увеличить на площадь образованных граней куба $cdef$. В результате F -функция примет вид:

$$F = \left[1 + \frac{tg\lambda}{2} (3 - tg^2\lambda) - \frac{x^2 tg\lambda}{2} (3 - 3tg^2\lambda + 2xtg^2\lambda) \right]^{-\frac{2}{3}} \left[\frac{3}{\cos\lambda} (2 - tg^2\lambda + tg\lambda) - \frac{3x}{\cos\lambda} (3 - 2tg^2\lambda + xtg^2\lambda + xtg\lambda) + 6x [1 - tg^2\lambda(1-x)] \right] \quad 70$$

Доля пентагондодекаэдра в огранении комбинации определяется из (70):

$$f_{\{hk0\}} = 1 - \frac{6x[1 - tg^2\lambda(1-x)]\cos\lambda}{3(2 - tg^2\lambda + tg\lambda) - 3x(3 - 2tg^2\lambda + xtg^2\lambda + xtg\lambda) + 6x\cos\lambda[1 - tg^2\lambda(1-x)]} \quad 71$$

Рассчитанные с использованием (70, 71) параболические уравнения F -функции для пар $\{100\}/\{hk0\}$ сведены в табл. 14 и на рис. 23.

Комбинация октаэдр – пентагондодекаэдр $\{210\}$

Выведем F -функции для комбинации октаэдра с пентагондодекаэдром $\{210\}$, встречающимся в огранении пирита. Полиэдр, представляющий комбинацию октаэдра и пентагондодекаэдра $\{210\}$ в соотношении 0.4 : 0.6 и состоящий из 20 равных треугольных граней, называется минералогическим икосаэдром. Если длину ребра октаэдра принять равной s , то площадь поверхности и объём этого икосаэдра будут равны: $S = 8.66 s^2$, $V = 2.18 s^3$. F -функция икосаэдра при равна $8.66 (2.18)^{-2/3} = 5/15$. Для рассматриваемой комбинации ПФ имеем координаты трёх точек, чтобы вывести уравнение F -функции в параболической форме. В качестве аргумента выступает доля пентагондодекаэдра $f_{\{210\}}$ в огранении: (0, 5.72), (0.6, 5.15), (1, 5.32). Решив построенную по этим координатам систему трёх уравнений, получим уравнение.

$$F_{\{111\}/\{210\}} = 1.38 f_{\{210\}}^2 - 1.78 f_{\{210\}} + 5.72 \quad 72$$

График этой F -функции дан красной кривой на рис. 23.

Комбинация тетраэдр – тригонритетраэдр

Формула F -функции этой комбинации $F_{T/3TT}$ выводится трансформацией ранее полученной формулы для комбинации октаэдр – тригонтриоктаэдр $F_{O/3TO}$:

$$\begin{aligned} F_{O/3TO} &= \left[0.4714 + \frac{tg\lambda_{(111)/(hhl)}}{3} (1-x^3) \right]^{\frac{2}{3}} \left[\frac{2\sqrt{3}}{\cos\lambda_{(111)/(hhl)}} - 2\sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{(111)/(hhl)}} - 1 \right) \right] \Rightarrow \\ &\Rightarrow F_{T/3TT} = \left[0.1179 + \frac{tg\lambda_{(111)/(hhl)}}{6} (1-x^3) \right]^{\frac{2}{3}} \left[\frac{\sqrt{3}}{\cos\lambda_{(111)/(hhl)}} - \sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{(111)/(hhl)}} - 1 \right) \right] \end{aligned} \quad 73$$

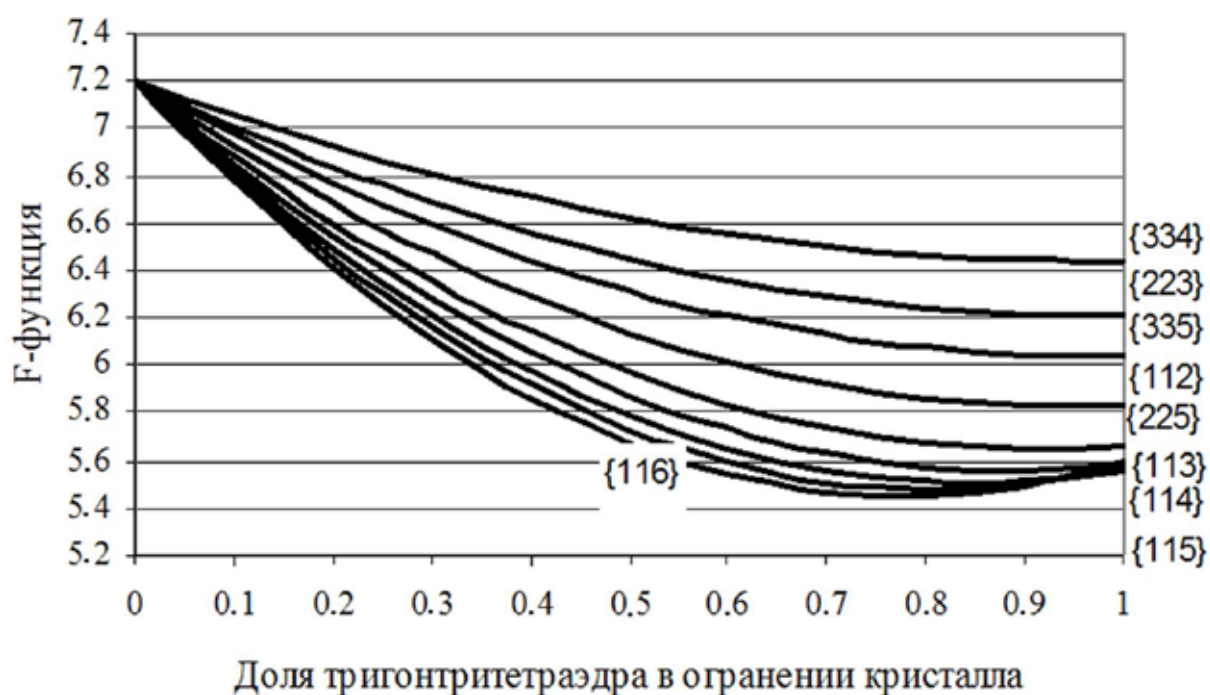
Доля тригонритетраэдра в огранении определяется выражением:

$$f = 1 - \frac{x^2 \cos\lambda_{(111)/(hhl)}}{1 - x^2 (1 - \cos\lambda_{(111)/(hhl)})} \quad 74$$

F -функции для комбинации тетраэдра с конкретными тригонритетраэдрами, встречающимися в огранении кристаллов, рассчитаны с помощью (73, 74) в параболической форме (табл. 15, рис. 24).

Таблица 15. F -функции комбинаций тетраэдр – тригонритетраэдр.

Комбинация тетраэдра с $\{hhl\}_{h<l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры по (73, 74)		F -функция
		$f_{\{hhl\}}$	$F(f_{\{hhl\}})$	
334	6.44115	0.9957	6.44108	$F = 0.78 f_{\{hhl\}}^2 - 1.54 f_{\{hhl\}} + 7.2$
223	6.21222	0.9827	6.21191	$F = 1.02 f_{\{hhl\}}^2 - 2.01 f_{\{hhl\}} + 7.2$
335	6.04589	0.9827	6.04506	$F = 1.22 f_{\{hhl\}}^2 - 2.38 f_{\{hhl\}} + 7.2$
112	5.82995	0.9610	5.82696	$F = 1.51 f_{\{hhl\}}^2 - 2.88 f_{\{hhl\}} + 7.2$
225	5.66343	0.8917	5.6532	$F = 1.83 f_{\{hhl\}}^2 - 3.37 f_{\{hhl\}} + 7.2$
133	5.58945	0.8441	5.5689	$F = 2.06 f_{\{hhl\}}^2 - 3.67 f_{\{hhl\}} + 7.2$
114	5.55895	0.7878	5.5126	$F = 2.36 f_{\{hhl\}}^2 - 4 f_{\{hhl\}} + 7.2$
115	5.56985	0.7229	5.4974	$F = 2.62 f_{\{hhl\}}^2 - 4.25 f_{\{hhl\}} + 7.2$
116	5.59615	0.6493	5.4991	$F = 2.9 f_{\{hhl\}}^2 - 4.5 f_{\{hhl\}} + 7.2$

Рис. 24. Изменения F -функции для комбинаций тетраэдр – тригонритетраэдр.

Комбинация тетраэдр – тетрагонритетраэдр

Образование этой комбинации можно представить как притупление вершин тетраэдра гранями тетрагонритетраэдра. С каждой вершины тетраэдра с длиной ребра s срезается малый отрицательный тетраэдр с длиной ребра sx . При этом срезанный тетраэдр замещается правильной трёхгранной пирамидой, боковые грани которой наклонены к грани отрицательного тетраэдра

$\{-111\}$ под углом $\lambda_{(hhl)/(\bar{1}1)} = \lambda_{(111)/(\bar{1}1)} - \lambda_{(111)/(hhl)}$. С учётом этого, F - функции комбинации $F_{T/4TT}$ получается из F -функции комбинации $F_{O/4TO}$:

$$F_{O/4TO} = \left[\frac{\sqrt{2}}{3} - x^3 (tg\lambda_{(111)/(100)} - tg\lambda_{(hhl)/(100)}) \right]^{\frac{2}{3}} \left[2\sqrt{3} - 6x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{(111)/(100)}} - \frac{1}{\cos\lambda_{(hhl)/(100)}} \right) \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow F_{T/4TT} = \left[\frac{\sqrt{2}}{12} - \frac{x^3}{6} (tg\lambda_{(111)/(\bar{1}11)} - tg\lambda_{(hhl)/(\bar{1}11)}) \right]^{\frac{2}{3}} \left[\sqrt{3} - \sqrt{3}x^2 \left(\frac{1}{\cos\lambda_{(111)/(\bar{1}11)}} - \frac{1}{\cos\lambda_{(hhl)/(\bar{1}11)}} \right) \right] \quad 75$$

при $0 \leq x \leq 0.5$

Доля тетрагонитетраэдра в огранении определяется выражением, получаемым из второго множителя в (75):

$$f = \frac{x^2}{\cos\lambda_{(hhl)/(\bar{1}1)} - x^2 \left(\frac{\cos\lambda_{(hhl)/(\bar{1}1)}}{\cos\lambda_{(111)/(\bar{1}1)}} - 1 \right)} \quad 76$$

F -функции для комбинаций тетраэдра с конкретными тетрагонитетраэдрами рассчитаны с помощью (75, 76) в параболической форме (табл. 16, рис. 25).

Таблица 16. F -функция комбинаций тетраэдр – тетрагонитетраэдр.

Комбинация тетраэдра с $\{hhl\}_{h>l}$	$F_{(hhl)}$	Параметры по (75, 76)		F -функции
		$f_{\{hhl\}}$	$F(f_{\{hhl\}})$	
$\{443\}$	6.51	0.689	6.46	$F = 1.24 f_{\{hhl\}}^2 - 1.93 f_{\{hhl\}} + 7.2$
$\{332\}$	6.30	0.670	6.27	$F = 1.48 f_{th}^2 - 2.38 f + 7.2$
$\{221\}$	5.92	0.634	5.96	$F = 1.84 f_{th}^2 - 3.12 f + 7.2$
$\{552\}$	5.72	0.614	5.82	$F = 2 f_{th}^2 - 3.48 f + 7.2$
$\{331\}$	5.61	0.602	5.73	$F = 2.13 f_{th}^2 - 3.72 f + 7.2$
$\{441\}$	5.50	0.587	5.65	$F = 2.29 f_{th}^2 - 3.99 f + 7.2$

Как частный случай из (75) при $\lambda_{(hhl)/(-111)} = 0$ получим F -функцию для комбинации положительный тетраэдр – отрицательный тетраэдр, часто встречаемой на кристаллах тетраэдрических классов симметрии:

$$F = (0.11785 - 0.4714x^3)^{-\frac{2}{3}} (1.732 - 3.464x^2) \quad 77$$

При $x = 0.5$ из (77) следует $F = 5.72$, форма кристалла соответствует ложному октаэдру, запрещённому в тетраэдрических классах симметрии.

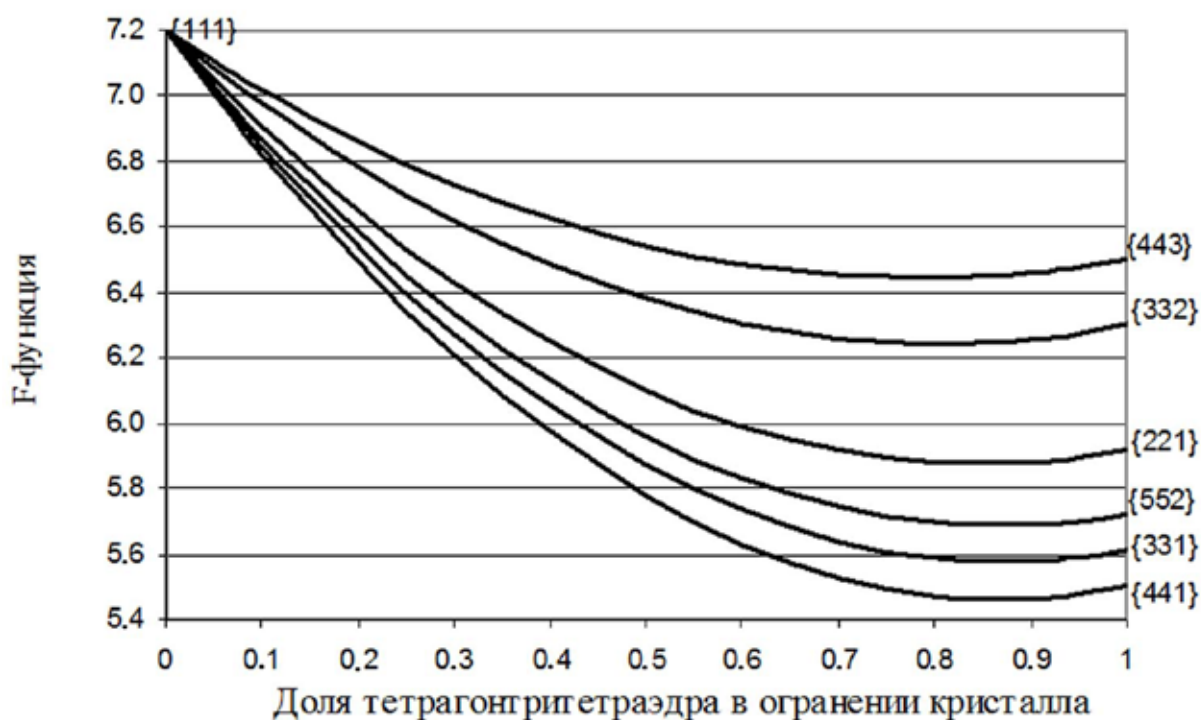


Рис. 25. Изменение F -функции для комбинаций тетраэдр – тетрагонритетраэдр.

Список литературы

1. Александров А.Д. Выпуклые многогранники. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1950. 330 с.
2. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М.: Физматгиз, 1964. С. 83-86, 211-213.
3. Минералы. Т. 1. Самородные элементы, интерметаллические соединения, карбиды, нитриды, фосфиды, арсениды, антимониды, висмутиды, сульфиды, селениды, теллуриды. М.: Изд-во АН СССР, 1960.

Статья 5. РАСЧЕТ F -ФУНКЦИИ ТРОЙНЫХ КОМБИНАЦИЙ ПРОСТЫХ ФОРМ КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ

Рассмотрим тройные комбинации с участием постоянных форм. Таких комбинаций в кубической сингонии с учётом кристаллографической несовместимости октаэдра и тетраэдра лишь две: куб – октаэдр – ромбододекаэдр и тетраэдр – куб – ромбододекаэдр.

Комбинация куб – октаэдр – ромбододекаэдр

Рассмотрим три случая доминантного развития одной из форм.

Случай 1. Доминанта $\{111\}$. На рис. 1 изображён октаэдр, вершины и рёбра которого срезаются гранями куба и ромбододекаэдра.

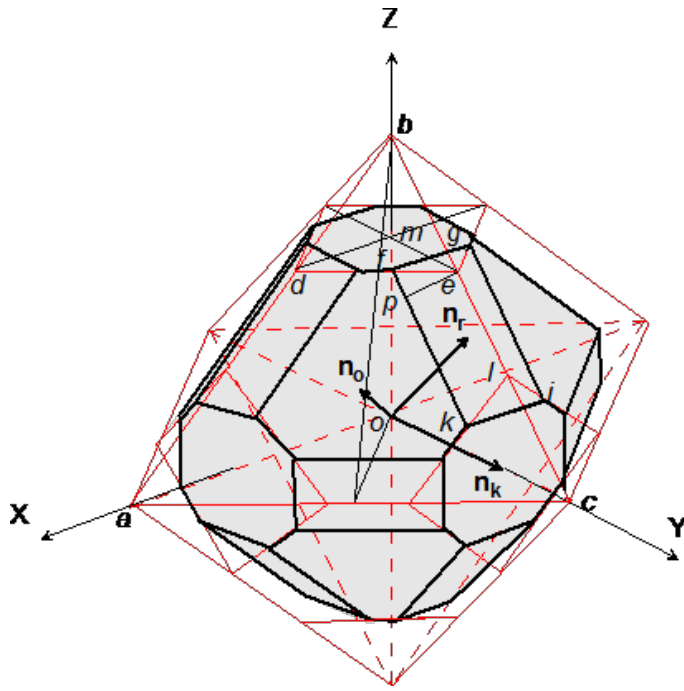


Рис. 1. Комбинация $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{111\}$. n_k , n_o , n_r – нормали к граням куба, октаэдра и ромбододекаэдра из центра кристалла.

Определим опорные элементы кристалла: c – ребро октаэдра; $cx = be$ – часть ребра октаэдра, отсекаемая гранью куба; $cxy = fe$ – часть ребра куба, отсекаемая гранью ромбододекаэдра. Используя геометрические зависимости между названными элементами с учётом симметрии кристалла, найдем площадь его поверхности S и объём V . Сначала определим площадь поверхности простых форм:

$\{110\}$:

$$\begin{aligned} S_{(110)} &= 12(fk \cdot fg) = 12(el + 2fp)fg = 12(bc - 2cx + 2fe \cdot \sin 30^\circ)fg = \\ &= 12\left(c - 2cx + 2cxy \frac{1}{2}\right)cxy\sqrt{2} = c^2(12\sqrt{2}xy - 24\sqrt{2}x^2y + 12\sqrt{2}x^2y^2) = \\ &= c^2(16.9xy - 33.8x^2y + 16.9x^2y^2) \end{aligned} \quad 1$$

$\{111\}$:

$$\begin{aligned} S_{(111)} &= 8(S_{abc} - 3S_{bde} - 3S_{felk}) = 8\left(\frac{\sqrt{3}}{4}(ab)^2 - 3\frac{\sqrt{3}}{4}(bd)^2 - 3\left(\frac{1}{2}(fk + el)pe\right)\right) = \\ &= 8\left(\frac{\sqrt{3}}{4}c^2 - 3\frac{\sqrt{3}}{4}c^2x^2 - 3\left(\frac{1}{2}(c - 2cx + cxy + c - 2cx)\right)\frac{\sqrt{3}}{2}cxy\right) = \\ &= 8(0.433c^2 - 1.3c^2x^2 - 2.6c^2xy + 5.2c^2x^2y - 1.3c^2x^2y^2) = \\ &= c^2(3.46 - 10.4x^2 - 20.8xy + 41.6x^2y - 10.4x^2y^2) \end{aligned} \quad 2$$

$\{100\}$:

$$\begin{aligned} S_{(110)} &= 6(S_{drze} - 4S_{fge}) = 6\left((de)^2 - 4\frac{1}{2}(fe) \cdot (eg)\right) = 6(c^2x^2 - 2c^2x^2y^2) = \\ &= c^2(6x^2 - 12x^2y^2) \end{aligned} \quad 3$$

Суммируя (1), (2) и (3), получим полную поверхность комбинации ПФ $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{111\}$:

$$S_n = c^2 \left(\begin{aligned} &3.46 - 10.4x^2 - 20.8xy + 41.6x^2y - 10.4x^2y^2 + 16.9xy - 33.8x^2y + 16.9x^2y^2 + \\ &+ 6x^2 - 12x^2y^2 \end{aligned} \right) = 4$$

$$= c^2 (3.46 - 4.4x^2 - 3.9xy + 7.8x^2y + 5.5x^2y^2)$$

Определим нормали к граням ПФ:

$$n_k = bo - bm = \frac{\sqrt{2}}{2}c - \frac{\sqrt{2}}{2}cx = c(0.7 - 0.7x) \quad 5$$

$$n_o = ot \cdot \sin \alpha = \frac{c}{2} \cdot \frac{bo}{bt} = \frac{c}{2} \cdot \frac{\sqrt{2}c}{2} \cdot \frac{2}{\sqrt{3}c} = \frac{1}{\sqrt{6}}c = 0.41c \quad 6$$

Для нахождения нормали к грани ромбододекаэдра воспользуемся рис. 2, представляющим сечение YOZ кристалла:

$$n_r = ow - ve = ow - ue \cdot \sin 45^\circ = \frac{c}{2} - cxy \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\sqrt{2}}{2} = c(0.5 - 0.5xy) \quad 7$$

Подставляя выражения (1-3, 5-7) в формулу Минковского [1], получим искомый объёма:

$$V = \frac{c^3}{3} \left[\begin{aligned} &(3.46 - 10.4x^2 - 20.8xy + 41.6x^2y - 10.4x^2y^2) \cdot 0.41 + (16.9xy - 33.8x^2y + 16.9x^2y^2) \cdot \\ &\cdot (0.5 - 0.5xy) + (6x^2 - 12x^2y^2)(0.7 - 0.7x) \end{aligned} \right] = 8$$

$$= c^3 (0.47 - 4.2x^2y^2 - 1.4x^3 + 8.4x^3y^2 - 2.8x^3y^3)$$

Приравняв в (8) объём к 1 и вычислив параметр c , подставим его в (4). Получим F -функцию комбинации ПФ $\{100\}$, $\{111\}$, $\{110\}$ при доминантном развитии октаэдра:

$$F = (0.47 - 4.2x^2y^2 - 1.4x^3 + 8.4x^3y^2 - 2.8x^3y^3)^{-\frac{2}{3}} (3.46 - 4.4x^2 - 3.9xy + 7.8x^2y - 5.5x^2y^2) \quad 9$$

Как частный случай при $y = 0$ выражение (9) преобразуется в уравнение для комбинации куба и октаэдра при доминантном развитии октаэдра. Доли ПФ в поверхности кристалла заданной формы равны:

$\{111\}$:

$$f_{\{111\}} = 1 - f_{\{110\}} - f_{\{100\}} \quad 10$$

$\{110\}$:

$$f_{\{110\}} = \frac{16.9xy - 33.8x^2y + 16.9x^2y^2}{3.46 - 4.4x^2 - 3.9xy + 7.8x^2y - 5.5x^2y^2} \quad 11$$

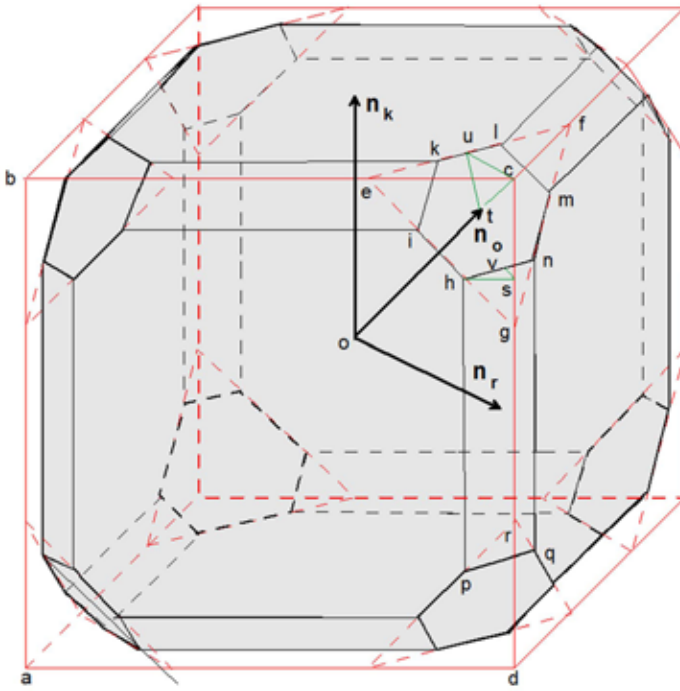


Рис. 3. Комбинация $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{100\}$. n_k , n_o , n_r – нормали к граням куба, октаэдра, ромбододекаэдра из центра кристалла.

Определим площадь грани каждой простой формы:

$$S_{(100)} = S_{abcd} - 4S_{ecg} - 4S_{hgrp} = ab \cdot bc - 4 \frac{ec \cdot cg}{2} - 4 \frac{1}{2} (hp + gr) \cdot hs =$$

$$= c^2 \left[1 - 4 \frac{x^2}{2} - 4 \frac{1}{2} (2 - 4x + 2 \frac{\sqrt{2}}{2} xy) \frac{\sqrt{2} \cdot xy}{2} \right] = c^2 (1 - 2x^2 - 2\sqrt{2}xy + 4\sqrt{2}x^2y - 2x^2y^2) =$$

$$= c^2 (1 - 2x^2 - 2.82xy + 5.64x^2y - 2x^2y^2)$$

$$S_{(111)} = S_{efg} - 3S_{hng} = \frac{\sqrt{3}}{4} 2c^2x^2 - 3 \frac{\sqrt{3}}{4} c^2x^2y^2 = \frac{\sqrt{3}}{4} c^2x^2(2 - 3y^2) =$$

$$c^2 (0.86x^2 - 1.3x^2y^2)$$

$$S_{(110)} = hp \cdot hn = (gr + 2sg) \cdot hn = (c - 2cx + \sqrt{2}cxy) cxy = c^2 (xy - 2x^2y + 1.41x^2y^2)$$

Умножив площадь одной грани на число граней ПФ, получим её полную поверхность:

$$S_{\{100\}} = 6c^2 (1 - 2x^2 - 2.82xy + 5.64x^2y - 2x^2y^2) \quad 16$$

$$S_{\{111\}} = 8c^2 (0.86x^2 - 1.3x^2y^2) \quad 17$$

$$S_{\{110\}} = 12c^2 (xy - 2x^2y + 1.41x^2y^2) \quad 18$$

Сложив (16-18), получим полную поверхность кристалла:

$$S_t = c^2 (6 - 5.08x^2 - 4.92xy + 9.84x^2y - 5.46x^2y^2) \quad 19$$

Далее определим нормали к граням ПФ:

$$n_k = c/2 \quad 20$$

$$n_o = oc - ct = oc - \sqrt{(uc)^2 - (ut)^2} = \frac{\sqrt{3} \cdot c}{2} - \sqrt{\frac{c^2 x^2}{2} - \frac{c^2 x^2}{6}} = c(0.86 - 0.58x) \quad 21$$

$$n_r = cc' - sv = \frac{\sqrt{2} \cdot c}{2} - \frac{cxy}{2} = c(0.7 - 0.5xy) \quad 22$$

Подставляя выражения (16-18), (20-22) в формулу Минковского, получим объём формы:

$$V = \frac{1}{3} \left[6c^2(1 - 2x^2 - 2.82xy + 5.64x^2y - 2x^2y^2) \frac{c}{2} + 8c^2(0.86x^2 - 1.3x^2y^2) \cdot \right. \\ \left. \cdot c(0.86 - 0.58x) + 12c^2(xy - 2x^2y + 1.41x^2y^2) \cdot c(0.7 - 0.5xy) \right] = \quad 23 \\ = c^3(1 - 3x^2y^2 - 1.33x^3 + 6x^3y^2 - 2.82x^3y^3)$$

Таблица 2. F -функции и соответствующие доли ПФ в ограничении кристалла для комбинации $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{100\}$.

x	Y	F	fo	fr	fk	x	y	F	fo	fr	fk
0	0	6	0.000	0.000	1.000	0.3	0.1	5.62	0.112	0.029	0.859
0.1	0	5.95	0.012	0.000	0.988	0.3	0.2	5.56	0.108	0.065	0.827
0.2	0	5.84	0.048	0.000	0.952	0.3	0.3	5.50	0.101	0.107	0.792
0.3	0	5.68	0.112	0.000	0.888	0.3	0.4	5.44	0.091	0.157	0.753
0.4	0	5.50	0.213	0.000	0.787	0.3	0.5	5.39	0.076	0.215	0.709
0.5	0	5.33	0.366	0.000	0.634	0.4	0.1	5.45	0.212	0.024	0.764
0.1	0.1	5.92	0.012	0.017	0.972	0.4	0.2	5.40	0.205	0.059	0.736
0.1	0.2	5.88	0.011	0.034	0.955	0.4	0.3	5.34	0.192	0.107	0.702
0.1	0.3	5.84	0.010	0.052	0.938	0.4	0.4	5.29	0.172	0.167	0.661
0.1	0.4	5.80	0.009	0.071	0.920	0.4	0.5	5.24	0.145	0.242	0.613
0.1	0.5	5.77	0.008	0.091	0.901	0.5	0.1	5.32	0.361	0.009	0.630
0.2	0.1	5.78	0.048	0.026	0.926	0.5	0.2	5.28	0.348	0.036	0.616
0.2	0.2	5.72	0.046	0.056	0.899	0.5	0.3	5.23	0.325	0.083	0.593
0.2	0.3	5.67	0.043	0.088	0.869	0.5	0.4	5.18	0.291	0.150	0.559
0.2	0.4	5.61	0.038	0.124	0.838	0.5	0.5	5.13	0.246	0.241	0.513
0.2	0.5	5.56	0.032	0.163	0.805						

Приравняв в (23) объём к 1 и вычислив параметр c , подставим его в (19). В итоге получим формулу F -функции кристалла при доминантном развитии куба.

$$F = (1 - 3x^2y^2 - 1.33x^3 + 6x^3y^2 - 2.8x^3y^3) \cdot \frac{2}{3} (6 - 5.08x^2 - 4.92xy + 9.84x^2y - 5.48x^2y^2) \quad 24$$

При $y = 0$ (24) преобразуется в уравнение F -функции для комбинации куба и октаэдра при доминантном развитии куба. Доли ПФ в поверхности

кристалла заданной формы равны:

$$f_{\{100\}} = 1 - f_{\{111\}} - f_{\{110\}} \quad 25$$

$$f_{\{111\}} = \frac{8(0.86x^2 - 1.3x^2y^2)}{6 - 5.08x^2 - 4.92xy + 9.84x^2y - 5.48x^2y^2} \quad 26$$

$$f_{\{110\}} = \frac{12(xy - 2x^2y + 1.41x^2y^2)}{6 - 5.08x^2 - 4.92xy + 9.84x^2y - 5.48x^2y^2} \quad 27$$

Рассчитанные по (24-27) значения F -функции кристалла и соответствующие им доли ПФ в огранении для $x \leq 0.5$ и $y \leq 0.5$ даны в табл. 2.

Случай 3. Доминанта $\{110\}$. На рис. 4 изображён ромбододекаэдр, вписанный в куб с ребром $2c$, разбитый на 8 октантов. 8 вершин ромбододекаэдра расположены в центрах октантов на пересечении объёмных диагоналей и срезаются гранями октаэдра. 6 вершин расположены в центре граней большого куба и срезаются его гранями. Определим опорные элементы для вычислений: $ae = c$ – ребро октанта; $ab = \frac{\sqrt{3}}{2}c$ – ребро полного ромбододекаэдра; $fb = \frac{\sqrt{3}}{2}cx$ – часть ребра ромбододекаэдра, срезаемая гранью октаэдра; $nc = \frac{\sqrt{3}}{2}cy$ – часть ребра ромбододекаэдра, срезаемая гранью куба.

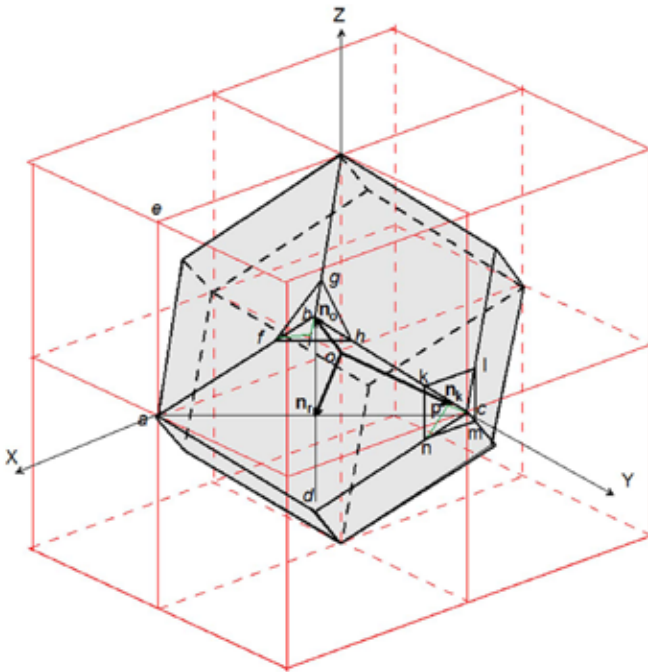


Рис. 4. Комбинация $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{110\}$. n_k , n_o , n_r – нормали к граням куба, октаэдра и ромбододекаэдра из центра кристалла.

Используя зависимости между элементами, найдём площадь поверхности S и объём V . Сначала определим поверхности ПФ:

$$S_{(110)} = 12 (S_{abcd} - 2S_{fbh} - 2S_{kcn}) = 12 \left(\frac{1}{2} ac \cdot bd - 2 \frac{1}{2} fh \cdot bq - 2 \frac{1}{2} kn \cdot cr \right) \quad 28$$

Вычислим элементы в (28), используя рис. 4:

$$ac = c\sqrt{2}, \quad bd = c, \quad fh = cx\sqrt{2},$$

$$bq = \sqrt{(fb)^2 - (fq)^2} = \sqrt{\frac{3}{4}c^2x^2 - \frac{2}{4}c^2x^2} = \frac{cx}{2},$$

$$kn = cy,$$

$$cr = \sqrt{(kc)^2 - (kr)^2} = \sqrt{\frac{3}{4}c^2y^2 - \frac{1}{4}c^2y^2} = \frac{\sqrt{2}}{2}cy$$

Подставив полученные элементы в (28), найдём площадь грани ромбо-додекаэдра:

$$S_{(110)} = 12 \left(\frac{1}{2} \sqrt{2}c \cdot c - 2 \frac{1}{2} \sqrt{2}cx \cdot \frac{cx}{2} - 2 \frac{1}{2} cy \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} cy \right) = c^2 (8.46 - 8.46x^2 - 8.46y^2) \quad 29$$

$$S_{(111)} = 8S_{fgh} = 8 \frac{\sqrt{3}}{4} (fh)^2 = 8 \frac{\sqrt{3}}{4} 2c^2x^2 = 4\sqrt{3}c^2x^2 = 6.92c^2x^2 \quad 30$$

$$S_{(110)} = 6kn^2 = 6c^2y^2 \quad 31$$

Сложив (29-31), получим полную поверхность кристалла, образованного комбинацией ПФ $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{110\}$:

$$S_n = c^2(8.46 - 1.54x^2 - 2.46y^2) \quad 32$$

Определим нормали к граням ПФ:

$$n_k = oc - pc = c - \sqrt{(nc)^2 - (np)^2} = c - \sqrt{\frac{3}{4}c^2y^2 - \frac{2}{4}c^2y^2} = c(1 - 0.5y) \quad 33$$

$$n_o = ob - bi = ob - \sqrt{(hb)^2 - \left(\frac{2}{3}fh \cdot \sin 60^\circ\right)^2} = \frac{\sqrt{3} \cdot c}{2} - \sqrt{\frac{3}{4}c^2x^2 - \frac{4}{9}2c^2x^2 \frac{3}{4}} = c(0.86 - 0.29x) \quad 34$$

$$n_r = \frac{\sqrt{2} \cdot c}{2} = 0.7c \quad 35$$

Подставляя (29-31) и (33-35) в формулу Минковского, получим объём кристалла заданной формы:

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{3} \left[c^2 (8.46 - 8.46x^2 - 8.46y^2) \cdot 0.7c + 6.92c^2x^2 (0.86 - 0.29x)c + 6c^2y^2 (1 - 0.5y)c \right] \approx \\ &\approx c^3 (2 - 0.67x^3 - y^3) \end{aligned} \quad 36$$

Приравняв в (36) объём к 1 и вычислив параметр c , подставим его в (32). Получим F -функцию для кристалла заданной формы:

$$F = (2 - 0.67x^3 - y^3)^{\frac{2}{3}} (8.46 - 1.54x^2 - 2.46y^2) \quad 37$$

Приравнявая в (37) поочередно x и y к 0, получим F -функции комбинаций ромбододекаэдр – куб и ромбододекаэдр – октаэдр. Доли ПФ в поверхности кристалла заданной формы равны:

$$f_{\{110\}} = 1 - f_{\{111\}} - f_{\{100\}} \quad 38$$

$$f_{\{111\}} = \frac{6.92x^2}{8.46 - 1.54x^2 - 2.46y^2} \quad 39$$

$$f_{\{100\}} = \frac{6y^2}{8.46 - 1.54x^2 - 2.46y^2} \quad 40$$

Рассчитанные по (37-40) F -функции и соответствующие им доли ПФ в ограничении для $x \leq 0.5$ и $y \leq 0.5$ даны в табл. 3.

Таблица 3. F -функции и соответствующие доли ПФ в ограничении кристалла для комбинации $\{100\}/\{111\}/\{110\}$ при доминантном развитии $\{110\}$.

x	y	F	fr	fo	fk	x	y	F	fr	fo	fk
0	0	5.33	1	0	0	0.3	0.1	5.26	0.918	0.075	0.007
0.1	0	5.32	0.992	0.008	0	0.3	0.2	5.23	0.895	0.076	0.029
0.2	0	5.30	0.967	0.033	0	0.3	0.3	5.18	0.856	0.077	0.067
0.3	0	5.27	0.925	0.075	0	0.3	0.4	5.14	0.800	0.079	0.121
0.4	0	5.25	0.865	0.135	0	0.3	0.5	5.10	0.725	0.081	0.195
0.5	0	5.23	0.786	0.214	0	0.4	0.1	5.24	0.857	0.135	0.007
0.1	0.1	5.31	0.985	0.008	0.007	0.4	0.2	5.20	0.834	0.136	0.030
0.1	0.2	5.27	0.963	0.008	0.029	0.4	0.3	5.16	0.794	0.139	0.068
0.1	0.3	5.23	0.926	0.008	0.066	0.4	0.4	5.11	0.736	0.142	0.123
0.1	0.4	5.18	0.872	0.009	0.119	0.4	0.5	5.08	0.657	0.146	0.197
0.1	0.5	5.15	0.800	0.009	0.192	0.5	0.1	5.22	0.778	0.215	0.007
0.2	0.1	5.29	0.960	0.033	0.007	0.5	0.2	5.18	0.753	0.217	0.030
0.2	0.2	5.25	0.938	0.033	0.029	0.5	0.3	5.14	0.711	0.220	0.069
0.2	0.3	5.21	0.900	0.034	0.066	0.5	0.4	5.09	0.650	0.225	0.125
0.2	0.4	5.16	0.845	0.035	0.120	0.5	0.5	5.06	0.567	0.232	0.201
0.2	0.5	5.13	0.772	0.036	0.193						

По данным табл. 1-3 построена триаграмма изменения F -функции комбинационных форм кристаллов в системе куб – октаэдр – ромбододекаэдр в зависимости от их долей в ограничении (рис. 5). Триаграмма представляет проекцию на треугольник составов (долей ПФ) перпендикулярных оси oZ сечений эллиптического параболоида с вершиной, соответствующей минимуму F -функции. Сечения параболоида, параллельные oZ и проведенные через его вершину параллельно одной из сторон треугольника составов,

представляют собой параболу, описывающую изменение F -функции в двойной комбинационной системе при постоянстве доли в ограничении третьей ПФ. Минимум F -функции 5.03 достигается при соотношении долей куба, октаэдра и ромбододекаэдра 0.25 : 0.26 : 0.49. Оно с точностью до первых единиц во втором знаке после запятой обратно пропорционально значениям F -функции соответствующих ПФ в шестой степени:

$$\frac{1}{[F(\{100\})]^6} : \frac{1}{[F(\{111\})]^6} : \frac{1}{[F(\{110\})]^6} = 0.23 : 0.31 : 0.46 \quad 41$$

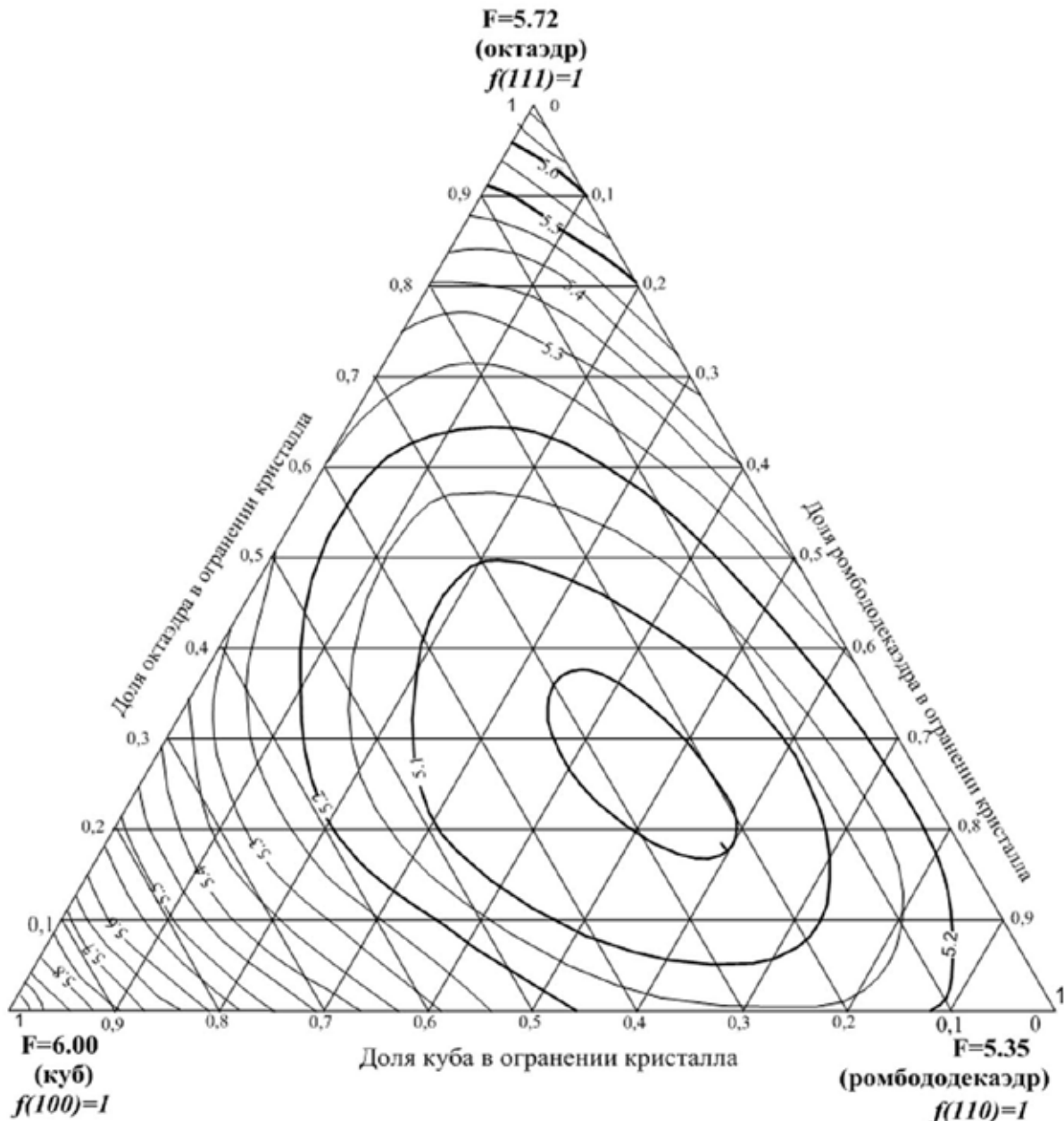


Рис. 5. Изменение F -функции комбинаций куб – октаэдр – ромбододекаэдр.

Оценка минимума F -функции по числу граней 26 полиэдра даёт $F(26) = 4.84 + 1.28 / 26 + 82.08 / 26^2 - 288 / 26^3 = 4.99$, с той же точностью, что и для координат минимума, приближённое к значению, определенно-

му геометрически. Это дает основание использовать приближённые методы определения координат минимума при расчёте F -функции комбинационных форм кристаллов в тройной системе тетраэдр – куб – ромбододекаэдр.

Ввиду равенства числа граней и близости F -функций ромбододекаэдра (5.35) и пентагондододекаэдра (5.32) построенная триаграмма применима и для комбинаций куб – октаэдр – пентагондододекаэдр.

Комбинация тетраэдр – куб – ромбододекаэдр

Ввиду трудоёмкости геометрического вывода F -функции в тройных системах, ограничимся построением триаграммы F -функции в зависимости от соотношения ПФ в огранении комбинационного полиэдра. Оцифруем стороны треугольника составов, рассчитав F -функцию по ранее выведенным формулам для двойных комбинаций: тетраэдр – куб, тетраэдр – ромбододекаэдр, куб – ромбододекаэдр.

$$\begin{aligned} F_{\{111\}/\{100\}} &= 4.24 f_{\{100\}}^2 - 5.44 f_{\{100\}} + 7.2 \\ F_{\{111\}/\{110\}} &= 3.09 f_{\{110\}}^2 - 4.94 f_{\{110\}} + 7.2 \\ F_{\{100\}/\{110\}} &= 1.72 f_{\{110\}}^2 - 2.43 f_{\{110\}} + 6 \end{aligned} \quad 42$$

Далее по приближенным формулам определим минимум F -функции и его координаты в рассматриваемой комбинации.

$$F_{\min}(22) = 4.84 + \frac{6.9}{22} - \frac{19.4}{22^2} + \frac{118}{22^3} = 5.12$$

Для определения координат минимума воспользуемся (41).

$$\frac{1}{[F(\{100\})]^6} : \frac{1}{[F(\{111\})]^6} : \frac{1}{[F(\{110\})]^6} = \frac{1}{6^6} : \frac{1}{7.2^6} : \frac{1}{5.3^6} = 0.3:0.1:0.6$$

По координатам нанесём на треугольник составов (рис. 6) точку минимума $F = 5.12$. Через неё проведем три отрезка, параллельных сторонам треугольника составов. Каждый из них представляет проекцию составов параболы, описывающей F -функцию при переменных долях в огранении кристалла двух ПФ и постоянстве доли третьей ПФ. Рассчитаем F -функцию по направлениям отрезков. На отрезке, параллельном стороне тетраэдр – ромбододекаэдр, определим значения F -функции на концах отрезка по (42):

$$(f_{\{100\}} = 0.3; f_{\{111\}} = 0.7; F = 5.95)(f_{\{100\}} = 0.3; f_{\{110\}} = 0.7; F = 5.17)$$

С координатами минимума имеем три точки для расчёта параболы, описывающей изменение F -функции вдоль отрезка. F -функцию выразим в виде $F = F(f_{\{110\}})$. Для расчёта постоянных в уравнении параболы по координатам трёх точек составим уравнения для: 1) $f_{\{110\}} = 0$, $F = 5.95$, 2) $f_{\{110\}} = 0.7$, $F = 5.17$, 3) $f_{\{110\}} = 0.6$, $F = 5.12$.

$$\begin{cases} c = 5.95 \\ 0.49a + 0.7b + 5.95 = 5.17 \\ 0.36a + 0.6b + 5.95 = 5.12 \end{cases} \quad 43$$

Решив (43) относительно a , b , c и подставив их в уравнение параболы, получим F -функцию вдоль заданного направления (рис. 6):

$$F = 2.69f_{\{110\}}^2 - 3f_{\{110\}} + 5.95 \quad \text{для } 0 \leq f_{\{110\}} \leq 0.7 \quad 44$$

По такому же алгоритму находим F -функции вдоль двух других направлений:

$$F = 1.67f_{\{110\}}^2 - 2.03f_{\{110\}} + 5.74 \quad \text{для } 0 \leq f_{\{110\}} \leq 0.9 \quad 45$$

$$F = 3.42f_{\{100\}}^2 - 1.79f_{\{100\}} + 5.35 \quad \text{для } 0 \leq f_{\{100\}} \leq 0.4 \quad 46$$

Рассчитанные по (42, 44-46) F -функции на заданных интервалах изменения переменных даны в табл. 4. По ней выполнена оцифровка треугольника составов, цифровое поле показано в изолиниях F -функции. Триаграмма (рис. 6) отражает возможные изменения формы кристаллов в системе тетраэдр – куб – ромбододекаэдр.

Таблица 4. F -функции комбинаций тетраэдр – куб – ромбододекаэдр.

$f_{\{111\}}$	$f_{\{100\}}$	$f_{\{110\}}$	F	$f_{\{111\}}$	$f_{\{100\}}$	$f_{\{110\}}$	F	$f_{\{111\}}$	$f_{\{100\}}$	$f_{\{110\}}$	F
0	1.00	0.00	6.00	0.40	0.60	0	5.46	0.1	0.40	0.50	5.14
0	0.90	0.10	5.77	1.00	0	0.00	7.20	0.1	0.30	0.60	5.12
0	0.80	0.20	5.59	0.90	0	0.10	6.74	0.1	0.20	0.70	5.14
0	0.70	0.30	5.43	0.80	0	0.20	6.34	0.1	0.10	0.80	5.18
0	0.60	0.40	5.31	0.70	0	0.30	6.00	0.1	0.00	0.90	5.27
0	0.50	0.50	5.23	0.60	0	0.40	5.72	0.7	0.3	0	5.95
0	0.40	0.60	5.18	0.50	0	0.50	5.50	0.6	0.3	0.10	5.68
0	0.30	0.70	5.17	0.40	0	0.60	5.35	0.5	0.3	0.20	5.46
0	0.20	0.80	5.20	0.30	0	0.70	5.26	0.4	0.3	0.30	5.29
0	0.10	0.90	5.25	0.20	0	0.80	5.23	0.3	0.3	0.40	5.18
0	0.00	1.00	5.35	0.10	0	0.90	5.26	0.2	0.3	0.50	5.12
1.00	0.00	0	7.20	0.00	0	1.00	5.35	0.1	0.3	0.60	5.12
0.90	0.10	0	6.70	0.1	0.90	0.00	5.74	0	0.3	0.70	5.17
0.80	0.20	0	6.28	0.1	0.80	0.10	5.55	0.40	0	0.60	5.35
0.70	0.30	0	5.95	0.1	0.70	0.20	5.40	0.30	0.1	0.60	5.21
0.60	0.40	0	5.70	0.1	0.60	0.30	5.28	0.20	0.2	0.60	5.13
0.50	0.50	0	5.54	0.1	0.50	0.40	5.20	0.10	0.3	0.60	5.12
								0.00	0.4	0.60	5.18

Использованная упрощённая методика построения триаграммы F -функции для комбинаций тетраэдр – куб – ромбододекаэдр может быть ис-

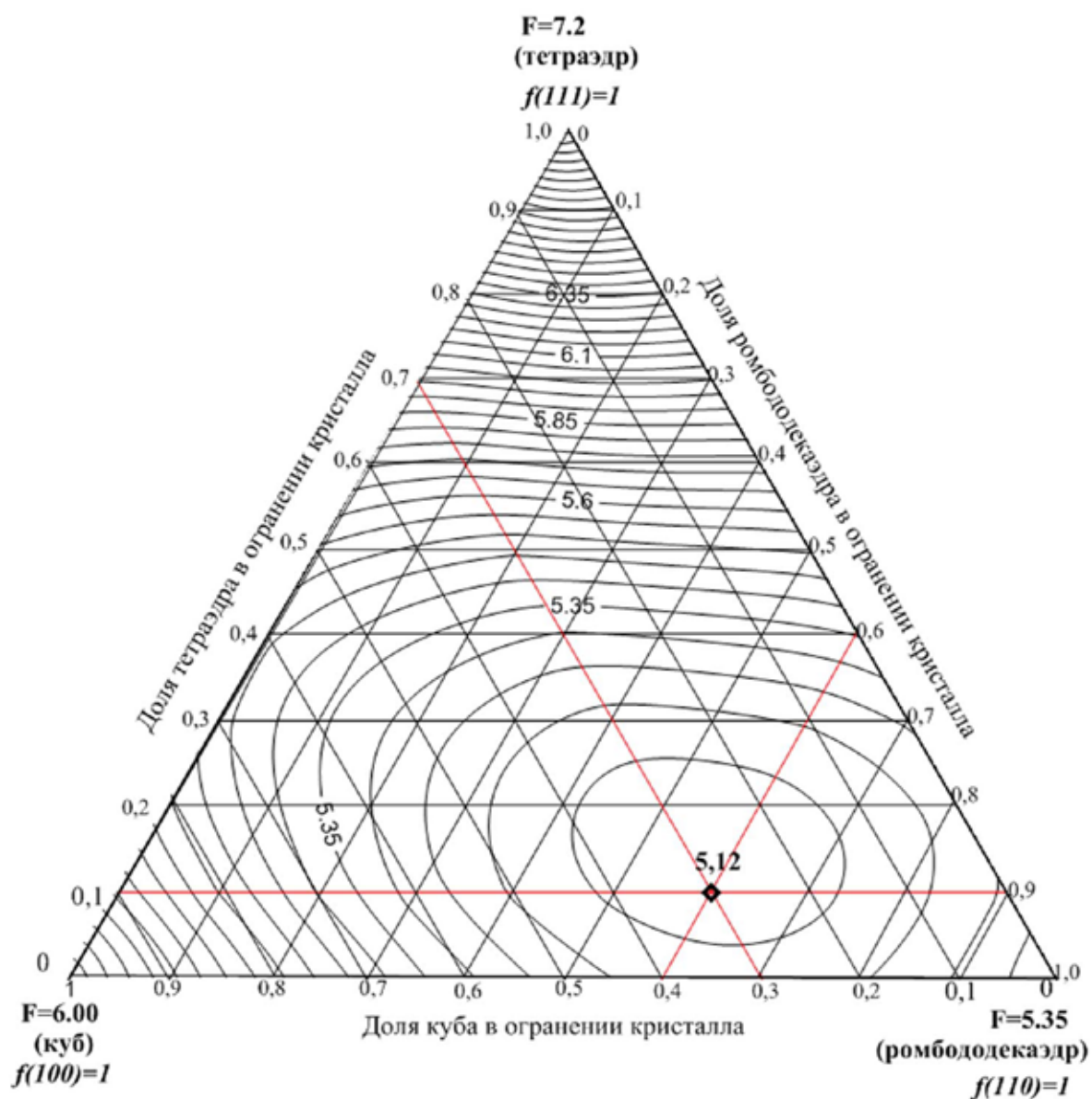


Рис. 6. F -функция комбинаций тетраэдр – куб – ромбододекаэдр.

пользована для построения триаграмм других комбинаций с участием переменных форм.

Список литературы

1. Александров А.Д. Выпуклые многогранники. М.-Л: Изд-во АН СССР, 1950. 330 с.

ТОПОЛОГИЧЕСКИ УСТОЙЧИВАЯ МИНИМАЛЬНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ, ПОЛИТОПЫ С СИММЕТРИЕЙ ГРУППЫ КОКСЕТЕРА F_4 И МОДЕЛИ БИОПОЛИМЕРОВ

Талис А.Л.

Институт элементоорганических соединений РАН, г. Москва,
talishome@mail.ru

Отображение на структурный уровень цепочки конструкций алгебраической геометрии и топологии позволило построить дискретную спиральную упаковку. Построенная модель локально периодична, отвечает области бифуркации и топологически устойчива в 3D евклидовом пространстве. Ограничивающая её минимальная поверхность имеет нулевой индекс неустойчивости. Её особые точки связаны преобразованиями, определяемыми 8-мерной решеткой E_8 . Эта структура оказалась моделью α -спирали.

Введение

Живая природа, отгораживаясь от неживой, использует для создания упорядоченных структур не трансляционно инвариантные (периодические) системы, а локально периодические и масштабно инвариантные (фрактальные) системы. Поэтому биологическое разнообразие на много порядков превосходит минералогическое, хотя для построения структур применяются практически одни и те же наборы химических элементов. Для кристаллических решёток конечность повторяемых объединений атомов (молекул) обеспечивается теоремой о конечности дискретных подгрупп ортогональной группы, а их идентичность – требованием трансляционной инвариантности. В случае систем, описываемых локально периодическими группами, требование конечности заключается в самом определении таких групп (все их подгруппы конечны), а условие идентичности отсутствует. Такой подход позволяет рассматривать решётчатые и локально решётчатые упаковки. В первом случае, когда элементами системы являются большие молекулы или их объединения, любые идентичные точки каждого элемента образуют трансляционную решётку. Во втором случае трансляционная инвариантность отсутствует, а сходство ограничивается локальными характеристиками, например, автоморфизмами 1-ой или 2-ой координационных сфер решётки. В общем случае для такой системы роль элементов симметрии выполняют порядковые автоморфизмы её группы преобразований и соответствующие им элементы алгебр.

Вторичная структура белка во многом определяется жёсткими ковалентными связями в полипептидной цепи и водородными связями между боковыми звеньями. Важную роль играют и стерические взаимодействия молекул, которые связаны с их размерами и формами, накладывающими жёсткие структурные ограничения на способы размещения молекул в пространстве.

Такие взаимодействия определяют и упаковки молекул в спирали, широко распространённые в биологическом мире [7, 8]. Среди спиральных биополимеров необыкновенной устойчивостью выделяется α -спираль (рис. 1 а, б). В ней реализуется предложенная Л. Полингом некристаллографическая ось с углом спирального вращения 100° . При этом между пептидными амидной i -ой и карбонильной $(i+4)$ -ой группами остатков возникают стабилизирующие α -спираль водородные связи [7, 8, 14]. Тем не менее через 60 лет после опубликования статьи [14] симметричное обоснование наличия в α -спирали именно 3.6 аминокислотных остатка на виток остаётся актуальным. Актуален этот вопрос и при рассмотрении структурных параметров других биополимеров. Иными словами, если симметрию кристалла определяет объединение орбит фёдоровской группы, то какие конструкции алгебраической геометрии и топологии определяют симметрию спиральных биополимеров?

Белки можно рассматривать как плотную упаковку более или менее одинаковых единиц – аминокислот, аппроксимируемую упаковкой тетраэдров. Плотнейшая упаковка регулярных тетраэдров достигается в 4-мерном полиэдре (политопе) $\{3, 3, 5\}$, связь подструктур которого с α -спиралью показана в [15]. Но в общем случае критерий плотной упаковки не определяет вторичную структуру белка [18]. В ван-дер-ваальсовых радиусах спиральный биополимер может быть частично аппроксимирован трубчатой спира-

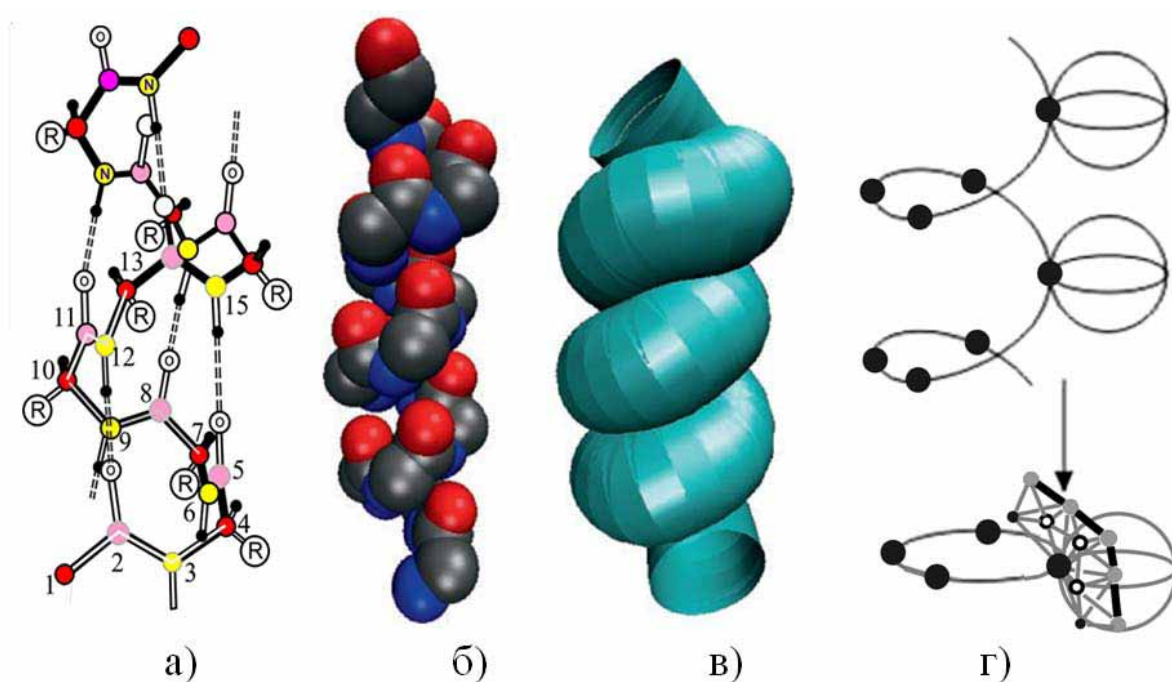


Рис. 1: а) структура α -спирали, R – радикалы, водородная связь показана пунктиром [8, рис. 7-5], красные, розовые, жёлтые, белые и чёрные шары – атомы C_α , N , C' , O , H ; б) структура α -спирали в ван-дер-ваальсовых радиусах; в) структура б) может быть помещена в трубчатую спираль радиуса $2.7 \text{ \AA}$, коаксиальную с полипептидной цепью [9, Figs. 4 a, b]; г) накрытие над букетом окружности и сферы $S^1 \cup S^2$ как набор сфер, прикрепленных к прямой, нарисованной как винтовая линия [1, рис. 103 б], чёрный кружок на каждой сфере – общая точка для S^1 и S^2 .

лью (рис. 1 в). Отношение объёма такой спирали к объёму цилиндра радиуса r определяет плотность упаковки трубчатой спирали, которая достигает максимума 0.784 при $r \approx r$ и равном 18.1° шаговом угле $\theta_{\max}$, определяемом отношением шага спирали h к радиусу r . Из рассмотренных в таком приближении спиральных биополимеров наиболее плотноупакованной оказалась α -спираль, параметры которой близки, но не совпадают с параметрами максимально плотноупакованной трубчатой спирали [9, 13]. Это несовпадение можно объяснить тем, что поверхность плотноупакованной трубчатой спирали не является топологически устойчивой системой [6] в пространстве E^3 . Суммируя изложенное, можно предположить, что α -спирали должна соответствовать топологически устойчивая поверхность, определяющая плотную спиральную упаковку тетраэдров.

По [6, 17], выделенные точки такой поверхности должны быть связаны преобразованиями симметрии политопа, который определяется подсистемой 8-мерной решётки октав E_8 , замыкающей ряд возможных чисел: действительные – комплексные – кватернионы – октавы [2, 4, 10]. Политопы являются экстремумами функционала объёма, к которым относятся и минимальные поверхности. Все линейчатые (при использовании полиэдральных построений этот фактор существенен) минимальные поверхности могут быть реализованы как однопараметрическое семейство геликоидов, параметром которого является межвитковый шаг [3]. Тетраэдр, аппроксимирующий упаковку 4 аминокислот, является симплексом E^3 , объединение тетраэдров определяет симплициальный комплекс [1]. Взаимосвязь между симплициальным (клеточным) комплексом и ограничивающей его в E^3 топологически устойчивой минимальной поверхностью определяется конструкцией расслоенного пространства для сферы S^3 в форме накрытия над букетом $S^1 \cup S^2$ окружности S^1 и сферы S^2 (рис. 1 г). Такой переход в E^3 от сферы S^3 , на которой размещены вершины политопа, возможен только при выделении на соответствующих сферах определённых многообразий и характеризующих их алгебр. Это означает существование единственной цепочки конструкций алгебраической геометрии и топологии, реализация которой в E^3 позволяет выделить искомую топологически устойчивую, геликоидально-подобную поверхность, определяющую плотную спиральную упаковку тетраэдров. Развиваемый аппарат [4-6, 16, 17] позволяет определять симметрии спиральных биополимеров структурными приложениями конструкций алгебраической геометрии и топологии. Эта работа посвящена выводу структурных параметров α -спирали и других биополимеров.

Минимальная поверхность с нулевым индексом неустойчивости и представление 3-мерной сферы расслоенным пространством

Решение задачи в первую очередь потребовало использования минимальных поверхностей, которые просто приводят к геликоидально-подобным (спиральным) структурам. Действительно, катеноид (геликоид)

является наибольшей минимальной поверхностью M определённого типа (линейчатых и т.д.) в классе связных минимальных поверхностей. Устойчивость спирального биополимера определяется топологической устойчивостью ограничивающей его поверхности, которая характеризуется индексом неустойчивости поверхности $\text{Ind } M$, равным числу способов изменения площади поверхности. Минимальная поверхность M устойчива, если любая непрерывная вариация на её границе увеличивает площадь M . Неустойчивость M растёт с $\text{Ind } M$, который составляет 1 для катеноида (рис. 2 б) и ∞ для геликоида (рис. 2 в). В сочетании с введением внешней метрики (фиксированных расстояний между атомами, молекулами) устойчивость M позволяет утверждать наличие определённого типа устойчивости и для ограниченного M объёма.

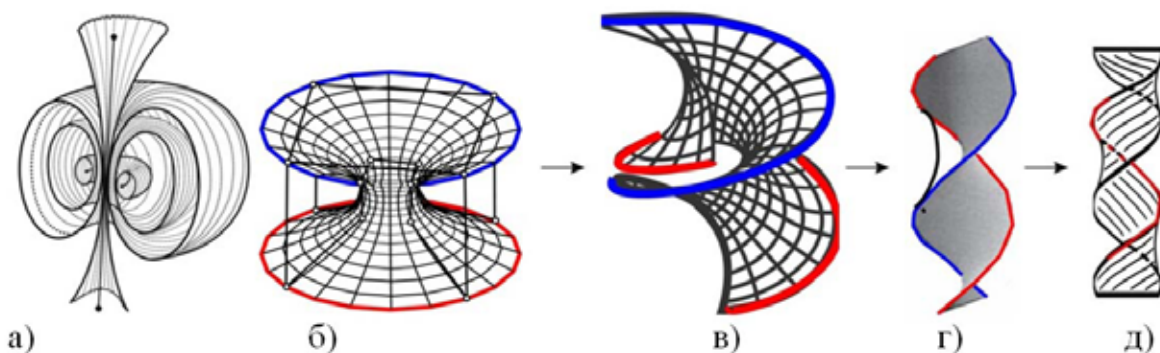


Рис. 2: а) проекция сферы S^3 в систему коаксиальных торов в E^3 ; б) проекция в E^3 политопа $\{4, 3, 3\}$, при которой все 16 вершин принадлежат катеноиду [12, Figs. 8, 9]; в) трансформация катеноида б) в геликоид, моделируемый мыльной плёнкой на контуре из двух спиралей и двух замыкающих отрезков; г), д) уменьшение шага спирали трансформирует геликоид в двуспиральную геликоидально-подобную намотку катеноида [3].

Структура минимальной поверхности M в E^3 определяется глобальным представлением Вейерштрасса [3] с использованием голоморфной 1-формы ω и мероморфной функции g . Для поверхностей с конечным индексом $\text{Ind } M$ функция g относится к классу функций с конечным числом нулей [6], что позволяет требовать её дробно-рациональности. В этом случае появляется возможность соотнести нули p -полиномов, для чего используется базис не содержащих квадраты многочленов группы Вейля решётки корней E_8 , фактически представляющей реализацию решётки нулей таких полиномов. При этом представления, отвечающие различным областям поверхности, склеиваются в единое глобальное представление Вейерштрасса, которое можно рассматривать как множество топологических пространств, склеенных из координатных областей (такое реализуется для клеточных комплексов).

Применение представлений Вейерштрасса [3] позволяет строить полные минимальные поверхности M . Они позволяют задать катеноид и гели-

коид, а в общем случае и ассоциированное с M семейство, состоящее из локально изометричных минимальных поверхностей (рис. 2 б, в). Геликоид и катеноид локально диффеоморфны, поэтому изгибанием в классе минимальных поверхностей можно, используя ассоциированные поверхности [3, 6], реализовать намотку геликоида на катеноид. При этом локальный диффеоморфизм (изоморфизм между векторами, задающими точки в локальных областях заданной конструкции), сохраняет метрику, т.е. преобразования типа изометрии или движения. Итак, геликоид можно представить в виде бесконечнолистной намотки на катеноид или сферу без южного и северного полюсов. При определенных условиях можно построить конфигурацию, объединяющую геликоид и катеноид, которая определяется суммарным радиус-вектором:

$$r(u, \varphi, \alpha) = r_1(u, \varphi) \cos \alpha + r_2(u, \varphi) \sin \alpha \quad (1)$$

где r_1, r_2 – радиус-векторы, описывающие катеноид и геликоид, (u, φ) – координаты на поверхности, φ – угол в цилиндрической системе координат. Угол $\alpha \in [0, \pi/2]$. При $\alpha = \pi/2$ образующая поверхности превращается в образующую геликоида, при $\alpha = 0$ – в цепную линию катеноида [3].

Для описания всех минимальных поверхностей, затягивающих контур, состоящий из двух соосных окружностей радиуса r в параллельных плоскостях на расстоянии h , достаточно описать все затягивающие его катеноиды. При малых h точка бифуркации, задаваемая решением уравнения:

$$\operatorname{cth}(h/2r) = h/2r \quad (2)$$

определяет две конфигурации, одна из которых близка к цилиндру (устойчивая), другая – к конусу (неустойчивая). При некотором критическом значении $h = h_{\text{кр}}$ оба катеноида образуют единую конфигурацию, превращаясь в плёнку (рис. 2 г, д), затягивающую каждую из окружностей плоским диском. Можно показать, что:

$$h_{\text{кр}} / 2\pi r = \operatorname{tg} \theta \approx 0.38 \quad \text{или} \quad h_{\text{кр}} \approx 2.4 r \quad (3)$$

где r – радиус цилиндра, отвечающего затягивающей плёнке (рис. 2 д), шаговый угол $\theta \approx 20.9^\circ$. Соотношение (3) задаёт точку бифуркации, в которой нарушается топологическая регулярность и формируется клеточная структура. Значительно упрощая, будем считать, что (3) определяет важное для приложений условие перехода от локально-минимальной к локально-цилиндрической поверхности, а именно поверхности, для которой окрестности каждой точки аппроксимируются цилиндрической поверхностью. В точке бифуркации нарушается топологическая регулярность, на рассматриваемом многообразии формируется клеточная структура [1].

Если для геликоидальных систем использовать глобальные изотермические координаты (u, v) , то декартовы координаты точек выражаются через гиперболические функции: $x = \operatorname{sh} u \times \operatorname{ch} v$, $y = \operatorname{sh} u \times \operatorname{sh} v$, $z = v$. Для ориентиро-

ванных поверхностей функции преобразования координат задают комплексную структуру, поэтому пара u, v заменяется комплексной координатой $z = u + iv$, которой можно сопоставить точку на E^2 . Пусть M задана представлением Вейерштрасса:

$$M \cong (U, \omega, (aw+b)^m) \quad C \supset U \rightarrow K \subset S^2 \quad 4$$

где $a \neq 0, b \in C, m$ – целое, ω – 1-форма, C – комплексная плоскость. По [3], $\text{Ind } M_0 = 0$, если для поверхности M_0 образ области U содержится в подмножестве K части сферы S^2 (без северного полюса), заключённой между двумя параллельными несовпадающими плоскостями, которые отстоят от центра сферы на расстояния t_0 , где t_0 является единственным положительным решением уравнения (2): $\text{ctht}_0 = t_0$ (нормировка на единичный радиус сферы). Эти плоскости отсекают полюсные области, составляющие около $1/12$ поверхности сферы. Для выполнения условия $\text{Ind } M_0 = 0$ необходимо также, чтобы M_0 была некомпактной (без края) или компактной, но с непустой границей и незамкнутой [6].

Изоморфная группе $SU(2)$ сфера S^3 может быть представлена как объединение двух 3D дисков, которому соответствует накрытие над букетом $S^1 \cup S^2$ окружности и сферы [1]:

$$SU(2) \cong S^3 = (D^3_+ \cup D^3_-) \sim S^1 \cup S^2 \leftarrow \sum_j S^2_j \quad 5$$

Пространством главного расслоения для $SU(2)$ является сфера S^7 , на которой расположены 240 точек 1-ой координационной сферы решётки корней E_8 максимальной исключительной алгебры Ли e_8 . Переход (при помощи конструкции координатного креста, обеспечивающего отображения $S^3 \rightarrow S^2$ и $S^3 \rightarrow S^1$ [1, 6]) от S^3 (рис. 2 а) к накрытию над букетом $S^1 \cup S^2$ (рис. 1 г) позволяет использовать многообразие на сфере S^2 из накрытия (5) для связи K и подмножеств комплексной плоскости C с многообразием на S^3 :

$$C \supset U \rightarrow K \subset S^2 \subset S \cup S^2 \leftarrow \sum_j S^2_j \sim S^3 \quad 6$$

где образ области U содержится при гауссовом отображении в подмножестве K . Гауссово отображение поверхности M^n в сферу S^n (в нашем случае отображение локальной области поверхности M^2 , на которой задана решётка, в дискретную систему на S^2) определяется следующим образом. В точках $x \in M^n$ задают единичные нормали n_x к поверхности и такие векторы перемещаются в начало координат сферы S^n так, что их концы задают точки на S^n (в рассматриваемых системах $n = 2, 3, 7$).

Политоп $\{3, 4, 3\}$ и подструктуры политопов с группой симметрии F_4

Соответствие между векторами решётки корней E_8 с векторами, задающими точки на S^3 , с последующим переходом к букету $S^1 \cup S^2$ и затем к рассмотрению поверхности M^2 , соотнесённой с соответствующим симплициальным (клеточным) комплексом, вложенной в E^3 , фактически позволяет

использовать глобальные представления Вейерштрасса. Политопу как векторному многообразию на сфере S^3 соответствует однородное векторное пространство в E^4 , которое характеризуется безразмерным вторым моментом инерции. Например, для ограниченного сферой S^3 шара он составляет 0.075... Из политопов, генерирующих соты в E^4 , наиболее близким к шару (следовательно, наиболее плотным) является политоп $\{3, 4, 3\}$ со вторым моментом 0.076... [2]. То есть, $\{3, 4, 3\}$ наиболее близок к экстремуму функционала объёма, соответствующему 4-мерному шару. Минимальная поверхность тоже является экстремумом функционала объёма. Поэтому базовым политопом для дискретной реализации конструкции M_0 необходимо выбрать политоп $\{3, 4, 3\}$ – орбиту группы F_4 (рис. 3 а, б). Можно показать [6], что соотношениям (4-5) и возможности совпадения вершин политопов с особыми точками M_0 будет удовлетворять политоп, соответствующий орбите группы F_4 [11].

При задании локально-решётчатых структур можно использовать комплексные и кватернионные векторы, поскольку, кроме целых вещественных чисел, есть три кольца целых: гауссовых $\{(a + ib); a, b \in \mathbb{Z}\}$, эйзенштейновых $\{(a + \omega b); a, b \in \mathbb{Z}, \omega = (-1 + i/\sqrt{3}) / 2\}$ и гурвицевых кватернионных. Вкладываемая в $\mathbb{C}$ решётка над кольцом циклотомических целых вида $\mathbb{Z}[\zeta]$, где $\zeta = \exp \pi i/4$, $\zeta^2 = i$ и $\zeta^4 = -1$, является вариантом вещественной решетки D_4 , поэтому 24 вершины проекции многогранника $\{3, 4, 3\}$ на плоскость можно представить элементами из $\mathbb{Z}[\zeta]$ (рис. 3 б). Из системы D_4 по квазиразложимости может быть получена система G_2 , которую образуют векторы 2-ой координационной сферы гексагональной решетки A_2 .

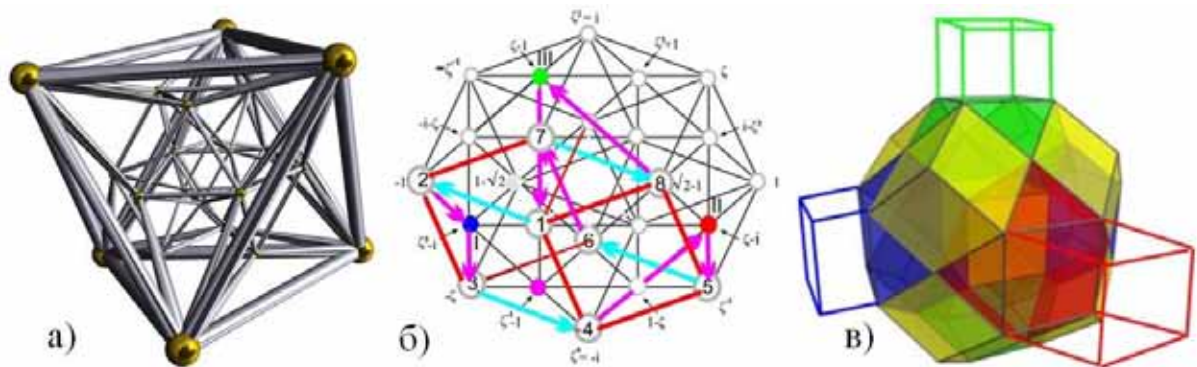


Рис. 3: а) проекция политопов $\{3, 4, 3\}$ в E^3 , на которой изображены все его вершины, рёбра, треугольные грани и октаэдрические ячейки (Fig. Robert Webb); б) проекция на комплексную плоскость политопов $\{3, 4, 3\}$, вершины которого представлены как элементы гауссовой решётки [2, рис. 8.1]; внутренние и наружные восьмёрки вершин – вершины политопов $\{4, 3, 3\}$, средняя восьмёрка вершин – вершины политопов $\{3, 3, 4\}$; занумерованные вершины одного из кубов политопов $\{4, 3, 3\}$ и 3 ближайших к нему вершины политопов $\{3, 3, 4\}$ (показаны жирными кружками) соединены 11 стрелками в замкнутую 11-вершинную цепочку; в) куб в политопе $\{3, 4, 3\}$ окружают 8 кубов, граничащих с ним по вершинам, и 6 кубооктаэдров, граничащих по граням. Выделены 3 куба, стоящие на гранях 3 кубооктаэдров, граничащих с центральным кубом; центрам 11 кубов (без центрального) соответствуют вершины цепочки, показанной на рис. 3б.

Середины 96 рёбер политопа $\{3, 4, 3\}$ являются вершинами полурегулярного политопа $\text{rectified } \{3, 4, 3\}$ (обозначаемого $r\{3, 4, 3\}$), состоящего из 24 кубов и 24 кубооктаэдров. Центрами кубов являются вершины исходного политопа $\{3, 4, 3\}$, кубооктаэдров – вершины дуального политопа $\{3, 4, 3\}^*$. Кубы граничат друг с другом по вершинам, кубооктаэдры – по треугольным граням, кубы с кубооктаэдрами – по квадратным (рис. 3 в). При сечениях, начиная с вершины, политопа $\{3, 4, 3\}$ плоскостью E^3 получим: вершину, соответствующую северному полюсу S^3 , 8 вершин северного куба, 6 вершин экваториального октаэдра, 8 вершин южного куба и вершину, соответствующую южному полюсу S^3 . Вершинам политопа $\{3, 4, 3\}$ соответствуют 24 элемента группы Гурвица единичных кватернионов, представимых в виде $24 = 2(1 + 11) = 2 + 22$, где 2 – это полюсные вершины, соответствующие ± 1 , а 11 – мнимые единичные кватернионы, соответствующие вершинам северного (южного) куба и вершинам грани экваториального октаэдра. Удалению двух полюсных вершин $\{3, 4, 3\}$ соответствует удаление двух полюсных кубов в политопе $r\{3, 4, 3\}$, в котором остаются 40-вершинные многообразия, а именно, северное и южное объединения 11 кубов (рис. 2 в), соответствующие дискам D^3 (5). Отображение вершин $r\{3, 4, 3\}$ на сферу S^2 и переход от 96 к $96 - 2 \times 8 = 80$ -вершинному множеству представляет собой дискретную реализацию отбрасывания $1/6 = 2 \times 1/12$ части S^2 , определяемого соотношениями (2-6).

Вершины, делящие каждое из 96 рёбер политопа $\{3, 4, 3\}$ на 3 части, являются вершинами полурегулярного 192-вершинного политопа $\text{truncated } \{3, 4, 3\}$ (обозначаемого $\text{tr}\{3, 4, 3\}$), состоящего из 24 кубов и 24 усечённых октаэдров $[4^6, 6^8]$, обладающих 6 квадратными и 8 гексагональными гранями. Центрами кубов являются вершины исходного политопа $\{3, 4, 3\}$, центрами $[4^6, 6^8]$ – вершины дуального политопа $\{3, 4, 3\}^*$. Кубы изолированы, усечённые октаэдры граничат друг с другом по гексагональным граням, кубы с усечёнными октаэдрами – по квадратным (табл. 1). Каждая вершина $[4^6, 6^8]$ принадлежит трём $[4^6, 6^8]$ полиэдрам, поэтому в шести $[4^6, 6^8]$, окружающих куб, содержатся 48 вершин. В шести изолированных друг от друга кубах, окружающих $[4^6, 6^8]$, тоже содержатся 48 вершин, поэтому отбрасывание куба (усечённого октаэдра) приводит к определению 40-вершинного многообразия из окружающих его в $\text{tr}\{3, 4, 3\}$ полиэдров, отвечающего условиям выделенной области. Аналогично построению 40-вершинного многообразия для $r\{3, 4, 3\}$, может быть построено 80-вершинное многообразие $(\text{tr}\{3, 4, 3\} - 2 \times 2 \times 8)/2$ и, соответственно, 160-вершинное многообразие $\text{tr}\{3, 4, 3\} - 2 \times 2 \times 8$, в котором 40-элементным векторным многообразиям соответствуют подобласти, отвечающие U-областям (6).

Таблица 1. Политопы с симметрией группы F_4 , определяемые снятием вырождения в политопе $\{3, 4, 3\}$.

Политоп	$\{3, 4, 3\}$	Rectified $\{3, 4, 3\}$	Truncated $\{3, 4, 3\}$
полиэдр, окружающий центр ячейки политопа $\{3, 4, 3\}$			
полиэдр, окружающий вершину $\{3, 4, 3\}$			
число вершин в политопе	24	$96 = 8/2 \times 24$	$192 = 8 \times 24$
число вершин в многообразии		$80 = 96 - 2 \times 8$	$160 = 192 - 2^2 \times 8$

Многообразие S^2 из накрытия над букетом диффеоморфно комплексной проективной прямой CP^1 из C^2 , при этом в CP^1 глобально минимальными подмногообразиями являются комплексные, тогда как в C^2 все комплексные подмногообразия некомпактны. Проективное многообразие RP^2 (из CP^1) неориентируемо, поэтому для определения M_0 как объединения U -областей надо использовать удвоение. Оно приведёт к построению незамкнутого $160 = 2 \times (2 \times 40)$ – элементного векторного многообразия, в котором 40-элементным многообразиям соответствуют подобласти, отвечающие U -областям. Так обеспечивается реализация цепочки:

$$S^3 \rightarrow S^1 \cup S^2 \rightarrow \sum_{j=1}^2 S_j^2 \rightarrow M_0 \leftarrow CP^1 \quad 7$$

в которой $2 \times (2 \times 40)$ – множество определяется многообразием для двух выделенных областей на двух слоях S_j^2 при 2×2 точках на базе S . Используемое удвоение многообразия $\{80\}$ до $\{160\}$ объясняется при трактовке гурвицева множество единиц как мультипликативной группы, изоморфной прямой сумме групп A_4 - знакопеременных групп степени 4. По [2], автоморфизмы, удаляющие ± 1 и оставляющие 22 элемента, определяют максимальные подгруппы M_{22} и M_{11} группы Матье M_{24} , содержащие по две 11-элементные орбиты $[1, 11, 1, 11]$, которые соответствуют группе $PSL_2(11)$.

Любое конформное преобразование на сфере (S^3 или S^2), близкое к тождественному, может быть представлено как однопараметрическое преобразование вида $exrkA$. Преобразования этого вида удовлетворяют (5-7), поэтому можно воспользоваться гомоморфизмом между 40-элементным многообразием $r\{3, 4, 3\} - 2 \times 8)/2$, соответствующим области U , и центрами содержащих его 11 кубов. Этот гомоморфизм продолжается до отображения 160-вершинного множества $tr\{3, 4, 3\} - 2 \times 2 \times 8$ на подмножество $2 \times (2 \times 11)$ вершин из

48-вершинного объединения политопов $\{3, 4, 3\}$ и $\{3, 4, 3\}^*$. Его вершины соответствуют $24 + 24$ векторам 2-й координационной сферы решётки D_4 [2]. Рассматриваемый гомоморфизм приводит к однопараметрической группе $\{\exp k \times 2\pi i k 11/40 \mid k = 1, 2 \dots\}$, которая при дополнительном условии $(\exp 2\pi i \times 11/40)^{40} \equiv 1$ или $\exp 2\pi i \times 11 \equiv 1$ образует группу по модулю $\{\exp k \times 2\pi i 11/40 \mid k = 1, 2 \dots 40\}$, соответствующую локальной нецелочисленной оси $40/11$. Определение этой оси рассмотрено в [6].

Параметры спиралей биополимеров в рамках развиваемого подхода

Действие локальной нецелочисленной оси $40/11$ означает спиральное вращение на угол $99^\circ = 11 \times 360^\circ/40$ и сдвиг вдоль оси на $11h/40$. Для защиты биополимеров от кристаллизации принципиально, что $40/11$ – бесконечная периодическая десятичная дробь. Так как $(99^\circ) \times 4 = 396^\circ$, то преобразование $\langle 40/11 \rangle^4 = 10_1$ связывает атом C_α из i -ой группы остатков с атомом C_α из $(i+4)$ -ой группы. Если кратчайшее расстояние между атомами C_α определяется преобразованием $\langle 40/11 \rangle^1$, то второе расстояние между атомами C_α – преобразованием $\langle 40/11 \rangle^4 = 10_1$ (рис. 1 а). Это означает, что традиционно характеризующий α -спираль цикл 4_{13} из 13 атомов определяется параметрической осью $40/11$, которая связывает начальный $(C_\alpha)_1$ и конечный $(C_\alpha)_5$ атомы:

$$\left\{ \bigcup_{i=0}^4 \langle 40 / 11 \rangle^i (N, C_\alpha, C')_1 \mid N_1 = C'_5 = 0, (C_\alpha)_1 \rightarrow O_1 \cup H_5 \leftarrow (C_\alpha)_5 \rightarrow 10_1 (C_\alpha)_1 \right\} \quad 8$$

Так как 10_1 связывает начальный и конечный атомы C_α , то из пятёрки звеньев (N, C_α, C') должны быть отброшены начальный N_1 и конечный C'_5 атомы. Связанные с C'_1 и N_5 атомы углерода $(C_\alpha)_1$ и $(C_\alpha)_5$ тетракоординированы, физическая связь между ними невозможна, поэтому вместо них в цикл входят также связанные с C'_1 и N_5 атомы O_1 и H_5 . Связь между атомами O_1 и H_5 возможна, и она замыкает традиционно характеризующий α -спираль цикл 4_{13} из 13 атомов (рис. 1 а). При этом число 13 в обозначении цикла 4_{13} действительно определяет число атомов в цикле, но 4 должно быть определено как степень оси $\langle 40/11 \rangle$, отображающей i -ый атом C_α в $(i+4)$ -ый атом C_α .

Общепринятые данные о структуре α -спирали [7, 8] позволяют считать, что 40 остатков равномерно распределены по 11 виткам основной спирали и по 4 спиралям, которые назовём i -спиралями, $i = 1, 2, 3, 4$. Каждая i -спираль соответствует линейной подструктуре из водородных связей, поэтому цилиндрическую аппроксимацию α -спирали [17, Fig. 5 с] можно рассматривать как результат размножения винтовой осью $40/11$ стартовой i -спирали из $40/4=10$ остатков. Нецелочисленной осью, дающей экспериментальные 3,6 остатков на виток, является ось $18/5$. Поскольку 18 не делится на 4, для возникновения (при указанном угле вращения) четырёх i -спиралей необходимо перейти к составной спирали $36/10$, которая представляет собой две спирали $18/5$ [17, Fig. 5 b]. Ближайшей к $36/10$ несоставной осью, которая может быть получена добавлением 4 остатков на виток, является

$40/11 = (36 + 4) / (10 + 1)$, которая спиральными вращениями на 99° отображает друг в друга четыре i -спирали, содержащие по 10 остатков в каждой [17, Fig. 5 c]. В отличие от $36/10$, ось $40/11$ выражается периодической десятичной дробью и удовлетворяет соотношениям (6-7), обеспечивающим топологическую устойчивость поверхности с такой осью.

Следующей за спиралью $40/11$, обеспечивающей существование четырех i -спиралей, является спираль $44/12 = (40 + 4) / (11 + 1)$, которая представляет собой учетверённую $11/3$. Именно $11/3$ соответствует средней длине наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках [7]. Ближайшая к $44/12$ – спираль $45/12$, которая представляет собой утроенную спираль $15/4$ с вращением на угол 96° . Для наблюдаемых длин α -спиралей в глобулярных белках относительные максимумы длин из 7, 11 и 15 остатков отвечают 2, 3 и 4 виткам [7]. Они могут рассматриваться как разбиение $40 = 7 + 7 + 11 + 15$ вершин (атомов C_α) α -спирали на циклы из 2, 2, 3 и 4 витков. Подструктуры, соответствующие таким циклам, могут быть охарактеризованы осями $7/2$, $7/2$, $11/3$, $15/4$, что позволяет определить ось $40/11 = 3.63(63)$ и однозначно соответствующую ей усреднённую (по циклам) ось в следующем виде:

$$\begin{aligned} (7+7+11+15) / (2+2+3+4) &= 3.(63) \rightarrow 40/11, \\ (7/2 + 7/2 + 11/3 + 15/4)/4 &= 3.6041(6) \rightarrow 18/5 \end{aligned} \quad 9$$

Соотношения (9) связывают определённую экспериментально для α -спирали [14] ось $18/5$ с осью $40/11$ идеальной (топологически устойчивой) α_0 -спирали.

Наряду со спиральным вращением, важнейшими характеристиками цилиндрической аппроксимации α -спирали являются межвитковое расстояние $h = 5.4 \text{ \AA}$ и радиус $r = 2.3 \text{ \AA}$ [1]. Для α -спирали соотношение $h/r \approx 2.349$ определяет шаговый угол $\theta_{\text{эксп.}} \approx 20.5^\circ$, при относительном коэффициенте упаковки спирали равным 0.996 [13]. Для максимально плотноупакованной спирали [13] шаговый угол θ равен 18.1° , тогда как для α_0 -спирали определённый (3) шаговый угол $\theta_{\text{крит}}$ равен 20.9° , что на 10 % ближе к $\theta_{\text{эксп.}}$, чем в [13].

Аналогично α_0 -спирали можно определить и симметрию π_0 -спирали [7, 8], задаваемой осью $30/7$. Соотношение $i \rightarrow i+5$ для водородной связи π_0 -спирали определяется соотношением $\langle 30/7 \rangle^5 = 6_1$, поэтому 30 остатков должны быть равномерно распределены по 7 виткам основной спирали $30/7$ и по 6 на каждой из 5 i -спиралей 6_1 . В этом случае $30 = 6 \times 5 = 2 \times 5 + 4 \times 5 = 2 \times 5 + 5 \times 4$, что определяет 2 и 5 витков с 5 и 4 остатками на каждом. Но π_0 -спираль в отличие от α_0 -спирали не удовлетворяет критерию топологической стабильности (2-7), поэтому π -спираль практически не реализуется, хотя в подходе [13] и близка к α -спирали по плотности упаковки – 0.777 и 0.781.

Симметрию спирали 3_{10} , которой соответствует $i \rightarrow i+3$, можно определить как результат трансформации спирали $30/11$, в которой 8 витков содержат по 3 остатка, 3 витка – по 2. Трансформация $30/11 \rightarrow 30/10$, а именно в кристаллографическую ось 3 порядка, задается соотношением $30 = 8 \times 3 + 3 \times 2 = 8$

$\times 3 + 2 \times 3 = 10 \times 3$, определяющим размещение 3 остатков на каждом из 10 витков. Аналогично, кристаллизацию α_0 -спирали посредством трансформации $40/11 \rightarrow 40/10$ определяет соотношение $40 = 7 \times 4 + 4 \times 3 = 7 \times 4 + 3 \times 4 = 10 \times 4$. Сопоставлению теоретических [6, 13] и экспериментальных [1] данных для рассмотренных спиралей полипептидных цепей посвящена табл. 2.

Таблица. 2. Экспериментальные [1] и теоретические – [6] жирный шрифт, [13] подчеркнуто – параметры спиралей полипептидных цепей.

Тип спирали	Остатков на виток	Локальная ось [6]	Шаг спирали h (Å)	Радиус спирали r (Å)	угол θ (1) ($^\circ$)	Угол $\theta_{\text{эсп.}}$ ($^\circ$)	Коэф. упаковки спирали	Угол θ [13] ($^\circ$)
3_{10} -спираль	3	30/10=3,(0)	6	1.9		26.6	0.690	
α -спираль	3.6	40/11=3,(63)	5.4	2.3	20.9	20.5	<u>0.781</u>	<u>18.1</u>
π -спираль	4.3	30/7=4,(285714)	4.73	2.8		15.0	<u>0.777</u>	

Заключение

В то время как определение точной геометрии биологических спиралей может быть затруднено, их топология определяется из стерического рассмотрения. Различные уровни структуры белка: первичная, вторичная или третичная – соотносятся с плотноупакованными структурами в 1, 2 или 3 измерениях. Плотнейшая упаковка правильных тетраэдров достигается в 4-мерном политопах $\{3, 3, 5\}$. В [6, 17] показано, что структурные параметры α -спирали определяются геликоидальным объединением по граням 7-вершинных четвёрок тетраэдров, которое задаётся осью 40/11. Данная упаковка тетраэдров определяет триангулированную поверхность, которая соответствует точке бифуркации для задаваемой представлением Вейерштрасса минимальной поверхности и обладает нулевым индексом неустойчивости IndM. Локально-цилиндрическая аппроксимация такой поверхности определяет однозначное соответствие между рассмотренной упаковкой тетраэдров и упаковкой объединений из 10 треугольников, которая вкладывается в триангулированную развертку цилиндра. Таким образом, определена математическая модель, параметры которой почти точно совпадают с параметрами α -спирали.

Выявленные симметричные закономерности строения (био) полимеров позволяют *a priori* (до реальных или компьютерных экспериментов) определять необходимые условия существования структур и их симметрично возможные трансформации. Иными словами, появляется возможность априорного отбора топологически устойчивых структур. Помимо замены в некоторых пределах компьютерного и/или интуитивного перебора вариантов применением соответствующих математических конструкций, результаты могут стать основой симметричной классификации (био) полимеров,

которая позволит уменьшить существующую субъективность. В свою очередь, это может быть использовано для оптимизации направленного синтеза (био) полимеров и предсказания их физико-химических и функциональных свойств. Возможные, но структурно не определённые симметрии могут указать на экспериментально пропущенные решения.

Автор выражает глубокую признательность М.И. Самойловичу за многолетний интерес к работе и стимулирующие обсуждения.

Список литературы

1. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. М.: Эдиториал, 2001. Т. 1. 336 с. Т. 2. 296 с. Т. 3. 288 с.
2. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решётки и группы. Т.1. М.: Мир, 1990. 414 с.
3. Тужилин А.А., Фоменко А.Т. Элементы геометрии и топологии минимальных поверхностей. М.: Наука, 1991. 175 с.
4. Самойлович М.И., Талис А.Л. Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решетка E_8 и определяемые ею кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. С. 599-606.
5. Самойлович М.И., Талис А.Л. Структурные закономерности геликоидально-подобных биополимеров в рамках алгебраической топологии. I. Особый класс устойчивых линейных структур, определяемых последовательностью алгебраических политопов. II. α -спираль и ДНК // Кристаллография. 2013. № 4. С. 521-529; № 5. С. 659-671.
6. Самойлович М.И., Талис А.Л. Симметричные основы структурной организации спиральных биосистем: α -спираль и ДНК-структуры // Матер. XIX межд. конф. «Высокие технологии в промышленности России». М.: Техномаш, 2014. С. 135-154.
7. Шульц Г., Ширмер Р. Принципы структурной организации белков. М.: Мир, 1982. 242 с.
8. Финкельштейн А.В., Птицын О.Б. Физика белка. М.: Книжный дом университета, 2005. 376 с.
9. Banavar J.R., Maritan A. Physics of proteins // Ann. Rev. Biophys. Biomol. Struct. 2007. V. 36. P. 261.
10. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. N.Y.: Dover, 1973.
11. Koca M., Koca R., Al-Barwani M. // J. Math. Phys. 2006. V. 47. N 043507-1.
12. Mosseri R., Di Vincenzo D.P., Sadoc J.F. et al. Polytope model and electronic and structural properties of amorphous semiconductors // Phys. Rev. 1985. B32. P. 3974-4000.
13. Olsen K., Bohr J. The generic geometry of helices and their close-packed structures // Theor. Chem. Acc. 2010. V. 125. P. 207.
14. Pauling L., Corey R.B., Branson H. R. The structure of proteins: two hydrogen-bonded helical configurations of the polypeptide chain // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1951. V. 37. P. 205-211.

15. Sadoc F.J., Rivier N. Boerdijk-Coxeter helix and biological helices // Eur. Phys. J. 1999. B12. P. 309-318.
16. Samoylovich M.I., Talis A.L. A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates // Acta Cryst. 2010. A66. P. 616-625.
17. Samoylovich M.I., Talis A.L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the framework of algebraic geometry: α - helix and DNA structures // Acta Cryst. 2014. A70. P. 186-198.
18. Yee D.P, Chan H.S, Havel T.F, et al. Does compactness induce secondary structure in proteins? // J. Mol. Biol. 1994. V. 241. P. 557-573.

СИММЕТРИЙНЫЕ ОСНОВЫ ОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СРОСТКОВ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ РАСПЛАВАХ

Талис А.Л.¹, Крапошин В.С.²

¹ Институт элементоорганических соединений РАН, г. Москва, talishome@mail.ru

² МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва, kraposhin@gmail.com

Выделен особый класс топологически устойчивых спиральных упаковок из триангулированных равнорёберных кластеров. Винтовые оси упаковок принадлежат к классу осей геликоидов Госсета, а кластеры определяются проективными специальными линейными группами $PSL_2(p)$, $p = 3, 5, 7, 11$. Рассмотрены взаимные трансформации этих спиральных упаковок, определяемые трансформациями кластеров, которые допускает система Штайнера $S(4, 5, 11)$. Предложена единая для жидкой и твёрдой матриц симметрийно возможная модель объединения спиральных упаковок. Рассмотрена модель сrostка MgO и шпинели $MgAl_2O_4$ в металлургическом расплаве типа $MgO - CaO - Al_2O_3 - SiO_2$.

Введение

Развиваемый нами аппарат обобщённой кристаллографии [7-9, 20, 21, 23] позволяет начинать решение проблемы сопряжения двух кристаллических структур в единый комплекс с определения общих принципов сборки структур из математически, а не субъективно определяемых минимальных строительных единиц. Тетраэдр – симплекс пространства E^3 , поэтому любой полиэдр может быть разбит на тетраэдры, т.е. представлен в форме симплицеального комплекса, которому соответствует определённое симплектическое многообразие. Все такие многообразия локально изоморфны (взаимно-однозначно соответствуют друг другу в локальном масштабе), что упрощает

их сборку. В нечётномерном пространстве E^3 симплектических структур нет, тогда как в четырёхмерном пространстве они легко строятся [3], например, в форме подструктур политопов [14], которые могут быть выпрямлены в E^3 . В частности, 3-мерные пространства Римана и Лобачевского локально евклидовы, поэтому их небольшие фрагменты могут быть вложены в E^3 . Локально изоморфные структуры в E^4 могут быть объединены в единую структуру, которая по определённым законам, удовлетворяющим топологическим свойствам E^3 , может быть выпрямлена в E^3 . В частности, это справедливо для спиральных упаковок из упомянутых выше минимальных строительных единиц. В качестве таковой в [12, 25] выделено 7-вершинное объединение по граням 4 тетраэдров с общей вершиной (рис. 1 а). Развёртка данного кластера определяется отбрасыванием 6 рёбер из карты $\{3,6\}_{2,1}$. В работах [8, 9, 21] выделение этого $2^2 + 2 + 1 = 7$ -вершинного кластера $\{3,6\}_{2,1}^6$ обосновано его однозначным выводом из минимального поля Галуа (порядка $p=2$). Объединение по общей грани двух таких кластеров определяет особый $2 \times 7 - 3 = 11$ -вершинный кластер [23], который может генерировать топологически устойчивую спиральную упаковку с винтовой осью m/p .

Спиральные упаковки тетраэдрических кластеров

Решетка E_8 определяет 240-вершинный 8-мерный полурегулярный политоп Госсета [5, 7-9, 14], который может трактоваться как прафаза рассматриваемых в дальнейшем структур. В [7] выделен особый класс геликоидов Госсета, винтовые оси которых m/p определяются соотношением:

$$m/p = 2^\gamma 8I_n / 4k_{js} m_{js} = 2^{\gamma+1} I_n / k_{js} m_{js} \quad 1$$

где $2^\gamma 8I_n$ и $8I_n$ – число вершин из второй и первой координационной сфер решётки E_8 ; $\gamma = 0, 1, 2$; $I_n, I_s = k_{js}(m_{js} + 1)$ – инварианты E_8 , k_{js} – целое, m_{js} – один из показателей, вкладываемых в E_8 подрешёток [5, 14]. При $\gamma = 0$, $I_n = 30$, для $k_{js} m_{js} = 2 \times 11, 4 \times 5, 6 \times 3, 4 \times 4$ и 6×1 получаем рассмотренные выше винтовые оси m/p : $30/11, 30/10 = 3, 10/3, 15/4, 10/1$. При $\gamma = 1$, $I_n = 0$, $k_{js} m_{js} = 2 \times 11$ и 4×5 получаем $m/p = 40/11$ и $40/10 = 4$.

Спиральные упаковки с винтовыми осями (1) из равнорёберных триангулированных полиэдров (кластеров), определяемых проективными специальными линейными группами $PSL_2(p)$, $p = 3, 5, 7, 11$, составляют особый класс линейных упаковок. Группы $PSL_2(3), PSL_2(5)$ – это группы вращений тетраэдра и икосаэдра, группа $PSL_2(7)$ определяет симметрию 7-вершинного кластера $\{3,6\}_{2,1}^6$ [5, 20, 21]. Надгруппа группы $PSL_2(11)$ определяет рассматриваемые далее особые 11-вершинные равнорёберные триангулированные кластеры. Спиральной упаковке из этого класса можно поставить в соответствие минимальную поверхность M , устойчивость которой характеризуется индексом неустойчивости поверхности $IndM$, равным числу топологически различных способов изменения её площади. Минимальная поверхность M устойчива, если любая непрерывная вариация

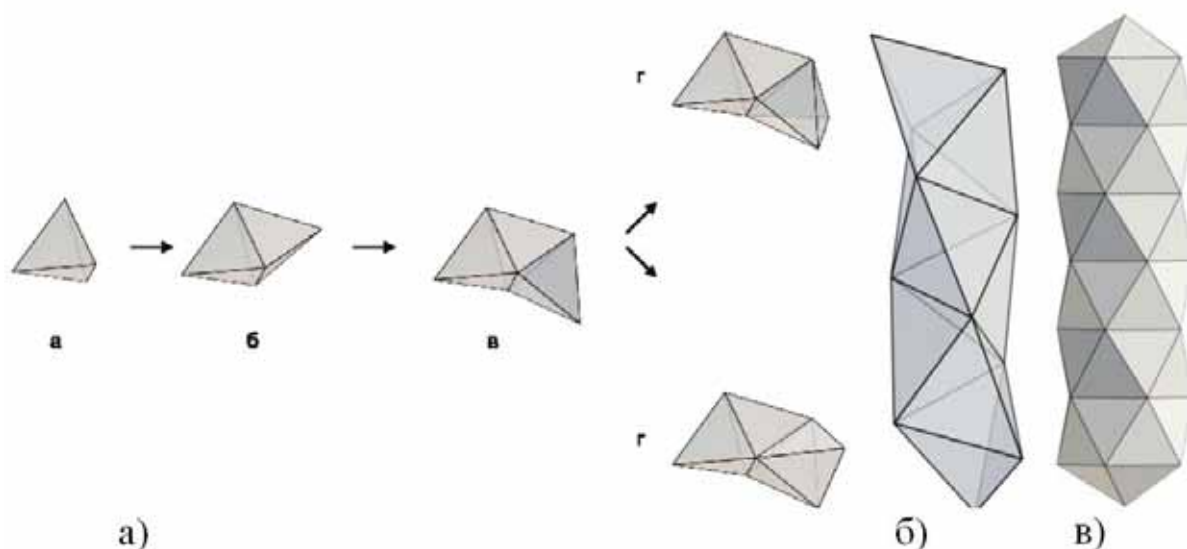


Рис. 1: а) объединения правильных тетраэдров от одного (а) до правого или левого (б) 7-вершинного объединения по граням 4 тетраэдров, обозначаемого $\{3,6\}_{2,1}^6$; б) геликоид Коксетера-Бордийка – спиральная упаковка правильных тетраэдров с осью 30/11; в) стержень из икосаэдров с общей осью 5-го порядка.

ция на её границе увеличивает площадь M . Неустойчивость M увеличивается с ростом $\text{Ind}M$, который составляет 1 для катеноида и ∞ для геликоида. В сочетании с введением внешней метрики (фиксированных расстояний между атомами, молекулами) устойчивость M позволяет утверждать наличие определенного типа топологической устойчивости и для ограниченного M объёма. В [21] построена минимальная поверхность с $\text{Ind}M = 0$, задающая параметры спирали из 7-вершинников $\{3,6\}_{2,1}^6$, которую можно определить как максимально топологически устойчивую спиральную упаковку из триангулированных равнорёберных полиэдров.

Можно построить кристалл в компьютере на основе квантово-химического расчёта межатомного взаимодействия атомов. В то же время кристалл является и орбитой фёдоровской группы дискретных движений E^3 , которая выводится чисто математически – без всякой физики. «Всякая комбинаторно-правильная плоская сетка может быть превращена комбинаторно-топологическим преобразованием в метрически правильную сетку. Следовательно, для формирования плоских сеток из однородных атомов достаточно только одинакового комбинаторного окружения. Любая такая плоская сетка может быть превращена в метрически правильную сетку без разрыва существующих связей. Группой такой сетки уже является плоская фёдоровская группа. Весьма возможно, что это имеет место и в трёхмерном пространстве, т.е. всякий комбинаторно-правильный трёхмерный каркас, узлы которого образуют системы Делоне, комбинаторно-топологическим преобразованием может быть превращён в метрически правильный каркас (т. е. его группа будет совпадать с одной из 230 фёдоровских групп)» [2, с. 129]. Это означает, что кристаллы – орбиты атомов 230 фёдоровских

групп, удовлетворяют условиям вложения в E^3 , и в этом смысле их можно считать топологически устойчивыми. Топологически устойчивыми будут и соответствующие кристаллам орбиты тетраэдров фёдоровских групп. Среди таких орбит максимально топологически устойчивыми будут плотнейшие упаковки ГЦК и ГПУ. Если определенный выше особый класс линейных упаковок сопоставить с кристаллографическими орбитами тетраэдров, то ГЦК и ГПУ будут соответствовать максимально топологически устойчивой спиральной упаковке из триангулированных равнорёберных полиэдров, для которой $\text{Ind } M = 0$.

Во введении говорилось, что возможности вложения в E^3 не ограничиваются только одномерными подгруппами фёдоровских групп (стержней). Оси (1) и группы $\text{PSL}_2(p)$, $p = 3, 5, 7, 11$, в общем случае нефёдоровские. Поэтому, хотя симметрия спиральной упаковки из определённого выше класса нефёдоровская, будем считать её топологически устойчивой при соответствии ей минимальной поверхности с конечным $\text{Ind } M$. Сборка по граням спирали из 7-вершинников $\{3, 6\}_{2,1}^6$ – орбита винтовой оси 30/11 (рис. 1 б) политопа $\{3, 3, 5\}$:

$$30/11 \times \{3, 6\}_{2,1}^6 = \{(\{3, 6\}_{2,1}^6)_i \mid (\{3, 6\}_{2,1}^6)_i \cap (\{3, 6\}_{2,1}^6)_{i+1} = \{3\}, i = 1, 2 \dots 30\} \quad 2$$

где $(\{3, 6\}_{2,1}^6)_i \cap (\{3, 6\}_{2,1}^6)_{i+1} = \{3\}$ означает наличие общей треугольной грани у двух соседних 7-вершинников, $(\{3, 6\}_{2,1}^6)_{i+1} = 30/11 (\{3, 6\}_{2,1}^6)_i$. Соответствующий угол поворота оси 30/11 равен в политопе $360 \times 11/30 = 132^\circ$, а два таких последовательных поворота, т.е. ось 15/4, реализуют вращение на 264° или на 96° в другую сторону:

$$15/4 \times \{3, 6\}_{2,1}^6 = \{(\{3, 6\}_{2,1}^6)_i \mid (\{3, 6\}_{2,1}^6)_i \cap (\{3, 6\}_{2,1}^6)_{i+1} = \{3\}, i = 1, 2 \dots 15\} \quad 3$$

Незначительная деформация рёбер тетраэдров изменяет этот угол до 90° . Если такую деформированную (до угла поворота 90°) тетраспираль размножать трансляциями по двумерной квадратной решётке, получим кристаллическую структуру BaCd_{11} [10], в которой параллельные спиральные упаковки Cd тетраэдров ориентированы вдоль 4-ой оси тетрагональной решётки. Тетраспираль можно транслировать и по трёхмерной кубической решётке, получается структура кубической β -модификация Mn [8, рис. 6]. Деформация рёбер также превращает эту ось в винтовую порядка 4 (т.е. 16/4) в кристаллической структуре β -Mn с углом поворота 90° .

Кристаллическая структура β -Mn [6, 8] не является экзотической. Во многих нержавеющих жаропрочных сталях в объёме основного металла присутствуют маленькие кристаллы (упрочняющие частицы, «вторые фазы») именно с этой структурой. Её имеют даже карбиды металлов (соединения с C). Такую же икосаэдрическую спираль образуют ионы I в кубической структуре суперионного проводника RbAg_4I_5 [15]. Положительные ионы Ag^+ дрейфуют вдоль оси I спирали, обеспечивая высокую ионную проводимость соединения при комнатной температуре. Геометрическое по-

добие спиралей в структуре металлических кристаллов и ионного проводника позволяет предположить, что симметрия первична в отношении типа кристаллической структуры по сравнению с физической природой химической связи (электронной структурой).

На рис. 1 в показано объединение икосаэдров в прямолинейную цепочку по общей оси 5-го порядка. В политопах $\{3, 3, 5\}$ ему соответствует тор с 10 вершинами на оси и 50 на поверхности. Каждые 10 вершин представляют собой орбиту винтовой оси 10_1 , поэтому тор образован 1 осевой и 5 поверхностными орбитами оси 10_1 и в целом обладает симметрией 10_1 . В 3D пространстве стержень собирается из неправильных тетраэдров, хотя наружные рёбра на его поверхности одинаковы. Если оставить все вершины на оси и по 3 вершины на каждом «этаже» стержня, то получим 40-вершинную упаковку правильных тетраэдров – максимально возможную упаковку правильных тетраэдров, выпрямляемую в E^3 из данного стержня политопа. Она представляет собой спиральное объединение по граням десяти 7-вершинников, обвивающих ось стержня [9, рис. 1 г]. Осью такого 40-вершинника является винтовая ось $10/3$ (поворот на 108° и смещение вдоль оси), а весь стержень – орбита оси из 7-вершинников:

$$10/3 \times \{3,6\}_{2,1}^6 = \{(\{3,6\}_{2,1}^6)_i | (\{3,6\}_{2,1}^6)_i \cap (\{3,6\}_{2,1}^6)_{i+1} = \{3\}, i = 1, 2 \dots 10\} \quad 4$$

Особый класс 11-вершинных равнорёберных триангулированных кластеров

Множество из v элементов, разбитое на подмножества (блоки) из k элементов так, что любые t элементов содержатся только в λ блоках называется t -(v, k, λ)-схемой [5, 11]. Нами показано [23], что 4-(11, 5, 1) схема или система Штайнера $S(4, 5, 11)$ выделяет особый класс 11-вершинных триангулированных кластеров $\{\Delta_{11}^j | j = 1, 2 \dots J\}$. Эта схема дана в табл. 1, число 10 для удобства обозначено римской X. Жирным шрифтом выделена крайняя левая колонка, являющаяся биплоскостью или системой 2-(11, 5, 2) с группой автоморфизмов $PSL_2(11)$. Числа 1, 3, 4, 5, 9, образующие стартовый блок B_1 подсистемы – квадраты поля Галуа порядка 11. В системе Штайнера $S(4, 5, 11)$ всего $11 \times 6 = 66$ блоков, отображаемые друг в друга $11 \times 6! = 7920$ перестановками (11 строк и все перестановки 6 столбцов), образующими группу симметрии системы.

Особый класс 11-вершинных триангулированных кластеров [23] порождается кластером Δ_{11}^1 , представляющим собой объединение 8 равнорёберных тетраэдров (рис. 2 а). Такой кластер встречается в структуре многих интерметаллидов. Именно эту фигуру образует изолированный кластер атомов In в структуре K_8In_{11} [22]. Кластер Δ_{11}^1 можно рассматривать как общую часть трёх взаимно пересекающихся икосаэдров в структурах $Al_{10}Mn_3$, Al_5Co_2 , $Al_{23}V_4$, γ -латуни и других [10].

Таблица 1. Система Штайнера S(4, 5, 11).

13459	07293	03618	0412X	06X59	05784
2456X	183X4	14729	15230	1706X	16895
35670	29405	2583X	26341	28170	279X6
46781	3X516	36940	37452	39281	38X07
57892	40627	47X51	48563	4X392	49018
689X3	51738	58062	59674	504X3	5X129
79X04	62849	69173	6X785	61503	6023X
8X015	7395X	7X284	70896	72615	71340
90126	84X60	80395	819X7	83726	82451
X1237	95071	914X6	92X08	94837	93562
02348	X6182	X2507	X3019	X5948	X4673

Взаимные отображения блоков, определяемых системой Штайнера S(4, 5, 11), моделируют физический процесс переброски диагоналей ромба (переключения химических связей, рис. 2 б, в). Ромб соответствует слегка изломанным (не плоским) ромбам кластера (рис. 2 а): 1-2-5-7, 1-7-9-X и т.д. Так, исходная короткая диагональ 1-5 ромба 1-2-5-7 после переброски становится длинной диагональю того же ромба, короткой становится бывшая длинная диагональ 7-2. Так мы перешли от трёх тетраэдров 1-5-4-2, 1-5-4-9 и 1-5-9-7 с общим ребром 1-5 к октаэдру 2-7-X-4-5-9. Новые короткие диагонали 7-2, 2-X и X-7 стали рёбрами верхней крышки возникшего октаэдра. Переход от тетраэдрического кластера (рис. 2 а) к объединению двух одношапочных октаэдров (рис. 2 г) определяют переброски диагоналей 19, 14 и

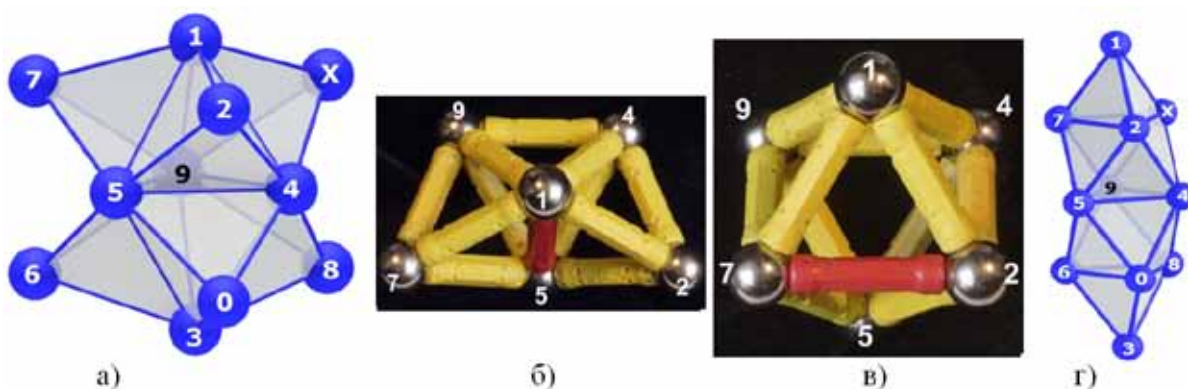


Рис. 2: а) исходный кластер Δ^1_{11} – 11-вершинное объединение по граням 8 правильных тетраэдров с общей осью 3 порядка; б), в) переброска общего (красного) ребра трёх тетраэдров трансформирует их в октаэдр; г) переброски типа б), в) трансформируют Δ^1_{11} в объединение двух одношапочных октаэдров с общей осью 3 порядка.

15 в ромбах 179X, 1X42 и 1257. Любая из указанных перебросок рёбер 19, 14, 15 оказывается переброской μ_{jk} общего ребра трёх объединенных по граням тетраэдров, которая переводит их в октаэдр (рис. 2 б, в). Подобная переброска [19] предложена для объяснения перехода между двумя изомерами молекулы карбоборана $C_2B_{10}H_{12}$ [18]. В нём переключаются связи между атомами В и С на поверхности икосаэдрической молекулы. В исходном изомере два атома С, образующие короткую диагональ ромба из двух треугольных граней икосаэдрической молекулы, после переброски диагоналей заселяют вершины длинной диагонали, т.е. разделены новой короткой диагональю – общим ребром треугольника. Это и есть другой изомер икосаэдрической молекулы $C_2B_{10}H_{12}$.

Анализ симметричных преобразований μ_{jk} блоков системы Штайнера $S(4, 5, 11)$ позволил найти преобразования, указывающие, какие диагонали надо перебросить, чтобы получить кластеры $\Delta_{11}^k = \mu_{jk}\Delta_{11}^j$, генерирующие типичные для металлов структуры конденсированных фаз. К таковым относятся: полиэдры Бернала с 8, 9 (рис. 3 а), 10 и 11 (рис. 3 б) вершинами, фрагменты кубической и гексагональной плотнейших упаковок, а также фазы высокого давления титана (ω -фазы, рис. 3 в), из которой вертикальным смещением атомных рядов получается объёмноцентрированная кубическая структура [23].

Объединение $\bigcup_{i=0}^1 (m/p)^{i(w)} \{3,6\}_{2,1}^6 = \Delta_{11}^j$, $(m/p)^0 = 1$ двух кластеров $\{3,6\}_{2,1}^6$ по общей треугольной грани генерирует их спиральную упаковку с винтовой осью $(m/p)^{i(w)}$, $w = 1, 2 \dots W$, где W – число осей, удовлетворяющих (1). Это 11-вершинное объединение Δ_{11}^j автоморфизмом μ_{jk} системы Штайнера $S(4, 5, 11)$ может быть трансформировано в кластер Δ_{11}^k . Конкретизируя типы комбинаторно различных 11-вершинных триангулированных кластеров, получим:

$$\mu_j \Delta_{11}^1 \leftrightarrow \bigcup_{i=0}^1 (m/p)^{i(w)} (\{3,6\}_{2,1}^6) \leftrightarrow Z11 \quad 5$$

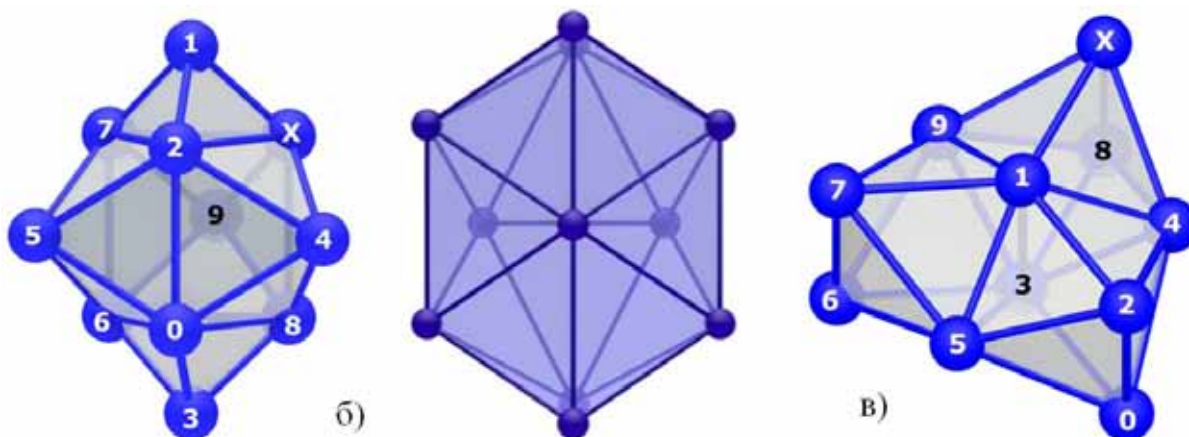


Рис. 3: а) 9-вершинный полиэдр Бернала с двумя дополнительными тетраэдрами на общей оси 3 порядка; б) полиэдр Бернала Z11 с 11 вершинами; в) объединение трёх октаэдров вокруг более длинного, чем остальные, общего ребра.

где $\mu_1 = 1$, $w = 1, 2 \dots W$, $j = 1, 2 \dots J$, J – число всех комбинаторно различных 11-вершинных кластеров, которые могут быть взаимно однозначно трансформированы в Δ^1_{11} . В отличие от кластеров, представляющих собой объединения тетраэдров, все вершины незначительно деформированного 11-вершинного полиэдра Бернала Z11 (рис. 3 б) могут быть размещены на сфере.

Кристаллические сростки в металлургических расплавах как объединения спиральных (стержневых) подструктур

Из соотношений (1-5) следует существование топологически устойчивых спиралей (стержней) с винтовыми осями $(m/p)_w$ из кластеров $\mu_j \Delta^1_{11}$, которые трансформациями σ^w_{fj} могут быть кооперативно преобразованы в спирали из кластеров $\sigma_{fj} \mu_j \Delta^1_{11}$ с винтовыми осями $(m/p)_s$:

$$\sigma^w_{fj} (m/p)_w \mu_j \Delta^1_{11} = (m/p)_s \sigma_{fj} \mu_j \Delta^1_{11} \quad 6$$

где $w = 1, 2 \dots W$, $s = 1, 2 \dots S$, $f = 1, 2 \dots F$, $j = 1, 2 \dots J$, числа I, S, F, J – конечные. Если трансформации σ_{fj} являются автоморфизмами системы Штайнера $S(4, 5, 11)$, то $\sigma_{fj} \mu_j = \mu_{if}$ – тоже автоморфизмы этой системы. В частности, при перебросках σ_1 и σ_2 систем рёбер в спиралях (3) и (4) из 7-вершинников $\{3, 6\}_{2,1}^6$ [9, рис. 1 г, е], эти спирали трансформируются в спираль 4_1 из граничащих по рёбрам правильных октаэдров $\{3, 4\}$ (рис. 4 в):

$$\sigma_1(10/3) \{3, 6\}_{2,1}^6 = 4_1 \{3, 4\} = \sigma_2(15/4) \{3, 6\}_{2,1}^6 \quad 7$$

где $4_1 \{3, 4\} \subset P4mm (4_1 \{3, 4\}) = Fm3m (\{3, 4\})$. Символом $Fm3m (\{3, 4\})$ обозначено объединение всех октаэдров ГЦК-решётки, определяемое и как орбита октаэдров группы $Fm3m$, совпадающая с орбитой спиралей $4_1 \{3, 4\}$ группы $P4mm$ [8, рис. 4 г]. Непересекающиеся спирали из октаэдров $4_1 \{3, 4\}$ охватывают все вершины ГЦК-решётки, поэтому не существует топологических (геометрических) препятствий для трансформаций каждой отдельной спирали $4_1 \{3, 4\}$ в одну из топологически устойчивых (6). Итак, определённые спиральные (стержневые) подструктуры можно выводить из политопа $\{3, 3, 5\}$ (в общем случае из решетки E_8), упаковывая тетраэдры в соответствии с осями (1). Трансформируя эти спирали в спирали 4_1 из граничащих по рёбрам правильных октаэдров, можно получить ГЦК-решётку. Выпрямляя другой 4-мерный политоп, а именно $\{3, 4, 3\}$, собранный объединением 3 октаэдров у каждого ребра, можно получить другие линейные подструктуры и объёмно-центрированную кубическую кристаллическую структуру (структурный тип W). В этом нетрудно убедиться, разбив ОЦК-структуру типа W на деформированные октаэдры. В общем случае, для получения тех или иных структур в E^3 могут быть использованы полуправильные политопы, разбивающие 3-мерную сферу посредством не одной, а нескольких ячеек.

Высокая плотность упаковки атомов в металлических стёклах, почти совпадающая с плотностью кристаллической упаковки, позволяет предположить, что основой металлических расплавов и стёкол M является объеди-

нение топологически устойчивых спиралей (6). Полиэдры $\sigma_{fj} \mu_j \Delta_{11}^1$ являются триангулированными, поэтому два полиэдра из соседних спиралей и сами спирали могут быть объединены топологической операцией связной суммы [3]. Для этого два ближайших друг к другу треугольника двух полиэдров $\sigma_{fj} \mu_j \Delta_{11}^1$ должны быть расположены так, чтобы между ними возникли 3 тетраэдра с общим ребром (рис. 2 б, в). В целом, тип такого объединения характеризуется предельными значениями S, J, F индексов s, f, j из (6). Они определяют разнообразие типов спиральных (стержневых) упаковок триангулированных полиэдров, отличающихся винтовыми осями и полиэдрами. Трёхмерно-упорядоченное объединение одинаковых спиралей внутри матрицы расплава L способно привести к образованию внутри него комплекса $\bigcup_{s,j,f}^{S',J',F'} (m/p)_s \sigma_{fj} \mu_j \Delta_{11}^1$ (при S',J',F' существенно меньше S, F, J) из нескольких кристаллических фаз. В пределе расплав может содержать и определяемые (7) частицы только ГЦК-решетки:

$$L \supset \bigcup_{s,j,f}^{S,J,F} (m/p)_s \sigma_{fj} \mu_j \Delta_{11}^1 \supset \bigcup_{s,j,f}^{S',J',F'} (m/p)_s \sigma_{fj} \mu_j \Delta_{11}^1 \supset \bigcup 4_1 \{3, 4\} \quad 8$$

Соотношение (8) можно рассматривать как симметричную основу топологически устойчивой модели расплава, определяемой как топологически устойчивое объединение топологически устойчивых спиралей (6) связной суммой.

На рис. 4 а дана микрофотография металлического сплава $MgZn$, подтверждающая спиральный рост кристаллов интерметаллического соединения $MgZn_2$ из жидкости [15]. Плотность состоящей только из тетраэдров спирали (рис. 1 б) соответствует плотности кристаллической упаковки, что объясняет высокую относительную плотность металлических жидкостей и стёкол (аморфных металлических сплавов). Она составляет 71-73 %,

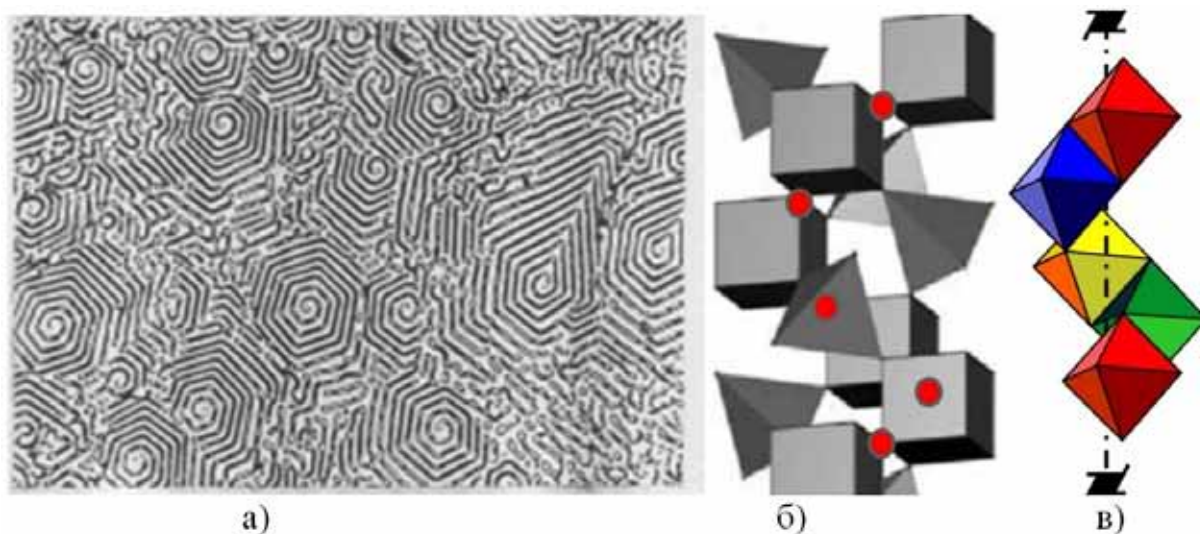


Рис. 4: а) микрофотография металлического сплава $MgZn$ [16]; б) спирали 4_1 из Mg тетраэдров и алюмоокислородных кубов; атомы Al показаны красными кружками [4, рис. 18 а]; в) спираль 4_1 из граничащих по общим рёбрам октаэдров [8, рис. 4].

в отличие от расчётной плотности хаотической плотной упаковки, достигающей в лучшем случае 64-66 %. Известны металлические стекла системы Pd-Ni-Cu-P [23], плотность которых выше плотности соответствующего кристаллического сплава – аналога. Ранее [17] мы применили подобные представления для описания плавления металлов как перехода от кристалла к объединению спиралей типа (8). Такой подход позволяет из первых принципов вычислить тепловой эффект плавления металлов в хорошем согласии с экспериментом. Появление жидкотекучести оказывается следствием механической эйлеровой неустойчивости длинных тетраэдрических стержней. А приблизительное сохранение (иногда увеличение) при плавлении плотности и других физических свойств обусловлено сохранением тетраэдрической упаковки, характерной для металлического твёрдого состояния. Трактовка металлических жидкостей и стёкол как объединения спиралей типа (8) даёт естественное объяснение магнитной анизотропии металлических стёкол и гигантской магнитострикции аморфного металлического сплава TbFe_{22} , на 2-3 порядка превышающую таковую обычных ферромагнетиков (удлинение ферромагнитного тела под действием магнитного поля) [13].

Развиваемая модель может быть конкретизирована для сростка MgO и шпинели MgAl_2O_4 в металлургическом расплаве типа $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$. Ядро из MgO представляет собой квадратную решётку спиралей с осью 4_1 из кислородных октаэдров, центрированных Mg и удовлетворяющих соотношениям (7). Шпинель представляет собой аналогичную (отличающуюся параметрами) упаковку 4_1 из кислородных октаэдров, центрированных Al, в которой кислородные тетраэдры центрированы Mg. Для превращения одной упаковки в другую или сращивания кристаллов MgO и MgAl_2O_4 необходимо ионы Mg переместить из кислородных октаэдров в тетраэдры. В то же время ионы Al должны заселить освобожденные Mg октаэдры. Этот обмен ионами может происходить в обе стороны (образования шпинели из окиси Mg или образования окиси Mg из шпинели). Этот обмен может происходить независимо в каждой из спиралей 4_1 , упакованных по квадратной решётке в обеих структурах. Но, обмен ионами может происходить в разные стороны на разных участках одной спирали. Эта возможность обеспечивает образование сростка по схеме ядро – оболочка. Т.е. участок спирали с ионами Mg в октаэдрах сменится участком спирали с ионами Al в октаэдрах. Поэтому для кислородных октаэдров единой спирали 4_1 необходим симметричный механизм замены Mg на Al и обратно. Возможность входа/выхода иона из октаэдра обеспечивается описанным выше механизмом трансформации объединения трёх тетраэдров с общим ребром в октаэдр (рис. 2 б, в). Выход иона Mg из октаэдра сопровождается трансформацией последнего в три тетраэдра с общим ребром. Вышедший из октаэдра ион Mg захватывается одним из соседних тетраэдров исходной октаэдрической цепочки. Заселяемые Mg тетраэдры образуют спираль с той же винтовой осью 4_1 , которой обладала исходная цепочка октаэдров.

Обратная трансформация 3 тетраэдров в октаэдр обеспечивает вхождение иона Al в октаэдр этой цепочки. Так как спирали 4_1 из кислородных октаэдров не имеют общих атомов, топологических препятствий для таких преобразований нет. На участке смены типа химического заселения октаэдров исходной цепочки (от Mg к Al, т.е. от окиси Mg к Mg шпинели) неизбежны искажения рёбер полиэдров вследствие разницы ионных радиусов. Если она по абсолютной величине станет недопустимой для устойчивости пространственной сетки (по Я.И. Френкелю около 10 %), то на этом участке могут произойти топологические допустимые (5-6) трансформации полиэдров. В частности, октаэдр с 2 прилегающими к нему тетраэдрами может быть трансформирован в 8-вершинный полиэдр Бернала (тетрагондодекаэдр), октаэдр с 3 тетраэдрами трансформируется в 9-вершинный полиэдр Бернала (трёхшапочная призма), и т.д. Для устранения деформаций рёбер из набора симметрично допустимых полиэдров возможно формирование межфазной границы между двумя компонентами сростка. Шлаковый расплав содержит также корунд, но проблем сопряжения с Al_2O_3 не возникает, поскольку структура этого соединения также представляет собой упаковку кислородных октаэдров, и шпинель совместима с ней по тройной оси.

Представленный качественный механизм пригоден для образования сростков из расплава и твёрдой фазы. Все фазы модели можно трактовать как объединение представленных выше спиралей: октаэдрических в MgO, CaO, $MgAl_2O_4$, Al_2O_3 и тетраэдрической в SiO_2 , спиральные упаковки сохраняются жидкой фазе, поскольку жидкотекучесть обусловлена гибкостью спиральных упаковок вследствие эйлеровой неустойчивости, а химические связи между компонентами шлака сохраняют тетраэдрическое и октаэдрическое окружения ионов. Возможность сопряжения разных участков спиралей в твёрдом состоянии подтверждается на уровне фёдоровских групп, поскольку справедливы соотношения группа – подгруппа:

$$Fm3m \supset Fd3m \supset P4_132 \supset P4_122 \subset I4/amd \subset Im3m \quad 9$$

Здесь $Fm3m$ – группа симметрии MgO, $Fd3m$ – $MgAl_2O_4$, $P4_132$ – деформированной кубической шпинели, трактуемой как квадратная решётка из октаэдрических спиралей 4_1 . При деформации кубической шпинели до тетрагональной получаем группу $P4_122$. Она, оставаясь квадратной решёткой октаэдрических спиралей, может быть деформирована до кубической $I4/amd$. Она является подгруппой группы $Im3m$ объёмно – центрированной кубической решётки. Последнее открывает возможность сопряженного роста не только из шлакового, но и из металлического расплава, поскольку Fe затвердевает в фазе δ -феррита с ОЦК-решёткой.

Выводы

1. Выделен особый класс спиральных упаковок с осями геликоидов Госсета (1) из равнорёберных триангулированных полиэдров (кластеров),

определяемых проективными специальными линейными группами $PSL_2(p)$, $p = 3, 5, 7, 11$. Рассмотрены взаимные трансформации этих спиральных упаковок, определяемые теми трансформациями кластеров, которые допускает система Штайнера $S(4, 5, 11)$.

2. Предложена единая для жидкой и твёрдой матриц симметрично возможная модель объединения рассматриваемых спиральных упаковок топологической конструкцией связной суммы.

3. Развиваемая модель конкретизирована для сростка MgO и шпинели $MgAl_2O_4$ в металлургическом расплаве типа $CaO-Al_2O_3-SiO_2$.

Расширение симметричного базиса кристаллографии позволяет описать строение конденсированных фаз, в том числе расплава и сростка двух кристаллов в единый объект. Модель можно рассматривать как необходимое условие существования системы, удовлетворяющей топологическим условиям вложения в E^3 . Реальность такой системы (достаточное условие) может быть определена соответствующими физическими расчётами.

Авторы выражают глубокую признательность М.И. Самойловичу за многолетний интерес к работе и стимулирующие обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-19-01726) через ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина.

Список литературы

1. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во АН СССР, 1947. 238 с.
2. Галиуллин Р.В. Кристаллографическая геометрия. М.: Наука, 1984. 136 с.
3. Дубровин Б.Л., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. М.: Эдиториал, 2001. Т. 1. – 336 с. Т. 2. – 296 с. Т. 3. – 288 с.
4. Иванов В.В., Таланов В.М. Модулярное строение наноструктур: информационные коды и комбинаторный дизайн // Наносистемы: физика, химия, математика. 2010. Т. 1, № 1. С. 72-107.
5. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решётки и группы. М.: Мир, 1990. Т. 1, 2. 791 с.
6. Крапошин В.С., Талис А.Л. Кристаллография и вещество // Природа. 2014. № 11. С. 3-15.
7. Самойлович М.И., Талис А.Л. Геликоиды Госсета. I. 8-мерная кристаллографическая решетка E_8 и определяемые ею кристаллографические, квазикристаллографические и нецелочисленные винтовые оси геликоидов // Кристаллография. 2007. Т. 52. С. 599-606.
8. Талис А.Л. Плотные геликоидальные упаковки шаров и закономерности строения тетраэдрических и тетракоординированных упорядоченных структур // Тр. VI Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: Изд-во К & М, 2010. С. 75-89.
9. Талис А.Л. Единая спиральная упаковка полиэдров, обладающая несколькими углами вращения, и другие нетрадиционные симметрии в (био)

полимерах // Тр. IX Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 93-100.

10. Шуберт К. Кристаллические структуры двухкомпонентных фаз. М.: Металлургия, 1964. 532 с.

11. Холл М. Комбинаторика. М.: Мир, 1970. 424 с.

12. Babiker H., Janeczko S. Combinatorial cycles of tetrahedral chains. IM PAN Preprint 741. 2012.

13. Coey J.M.D. Magnetism and magnetic materials. Cambridge, New York, Melbourne, Madrid, Tokyo: Cambridge University Press, 2010.

14. Coxeter H.S.M. Regular polytopes. New York: Dover, 1973. 321 p.

15. Geller S. Crystal structure of the solid electrolyte RbAg₄I₅ // Science. 1967. V. 157. P. 310-312.

16. Fullman R., Wood D. Origin of spiral eutectic structures // Acta Metallurgica. 1954. V. 2. P. 189-193.

17. Kraposhin V.S., Talis A.L., Samoylovitch M.I. Axial (helical) substructures determined by the root lattice E₈ as generating clusters of the condensed phases // J. Non-Cryst. Sol. 2007. V. 353. P. 3279-3284.

18. Lipscomb W.N. Framework rearrangement in boranes and carboranes // Science. 1966. V. 153. N 3734. P. 373-378.

19. Rivier N. Foams and Emulsions. Dordrecht: Kluwer Acad. Publishers. 1999. P. 105-125.

20. Samoylovich M.I., Talis A.L. A special class of simple 24-vertex polyhedra and tetrahedrally coordinated structures of gas hydrates // Acta Cryst. 2010. A66. P. 616-625.

21. Samoylovich M.I., Talis A.L. Symmetry of helicoidal biopolymers in the frameworks of algebraic geometry: α -helix and DNA structures // Acta Cryst. 2014. A70. P. 186-198.

22. Sevov S., Corbett J. A remarkable hypoelectronic indium cluster in K₈In₁₁ // Inorg. Chem. 1991. V. 30. P. 4877-4880.

23. Talis A.L., Kraposhin V.S. Finite noncrystallographic groups, 11-vertex equiedged triangulated clusters, and polymorphic transformations in metals // Acta Cryst. 2014. A70. P. 616-625.

24. Tsyplakov A.N., Mitrofanov Yu.P., Khonik V.A. et al. Relationship between the heat flow and relaxation of the shear modulus in bulk PdCuP metallic glass // J. Alloys and Compounds. 2015. V. 618. P. 449-454.

25. Zheng C., Hoffmann R., Nelson D. A Helical face-sharing tetrahedron chain with irrational twist, Stella Quadrangula and related matters // J. Am. Chem. Soc. 1990. V. 112. P. 3784-3791.

О ЧИСЛЕ РЕШЕТЧАТЫХ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ НА ПОЛИМИНО ЗАДАННОЙ ПЛОЩАДИ

Шутов А.В.¹, Коломейкина Е.В.²

¹ Владимирский госуниверситет, г. Владимир,

² Московский гостехуниверситет им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Введение

Полимино представляет собой фигуру на плоскости, составленную из конечного числа единичных квадратов, которая сильно связна, то есть из любой клетки в любую другую этого полимино можно попасть, переходя по общим сторонам смежных клеток. Это понятие введено в [1, 2] и с тех пор привлекает любителей математики и профессионалов всего мира. Одной из самых важных и пока нерешённых задач является нахождение необходимого и достаточного условия существования разбиения плоскости на заданные полимино. В [3] найдены все классы полимино, разбивающие плоскость, с числом клеток ≤ 7 . Позднее для числа клеток ≤ 9 аналогичное исследование проведено в [4]. В [5] дана классификация полимино по типу даваемого ими простейшего разбиения плоскости для числа клеток ≤ 25 .

Основные понятия

Определения: разбиение называется трансляционным, если любую фигуру разбиения можно перевести в любую другую некоторым параллельным переносом. Разбиение называется решётчатым, если любую фигуру разбиения можно перевести в любую другую параллельным переносом, причём это преобразование переводит всё разбиение в себя.

Без ограничения общности можно считать, что все вершины полимино являются точками целочисленной решётки Z^2 . Очевидно, решётчатые разбиения плоскости являются подмножеством трансляционных разбиений. Мы будем рассматривать решётчатые разбиения плоскости на полимино, гомеоморфные диску. Также будем предполагать, что решётка периодов разбиения является подрешёткой целочисленной решётки Z^2 .

Можно доказать, что существуют ровно два топологически различных типа решётчатых разбиений плоскости, а именно: правильные разбиения на квадраты и шестиугольники. Пусть n – площадь полимино, то есть оно состоит из n квадратов площадью 1 кв. ед. каждый. Возникает задача подсчитать число $T(n)$ трансляционных разбиений плоскости на полимино заданной площади n . Числа $T(n)$ для малых n вычислены в [4, 6]. Число трансляционных разбиений плоскости на полимино заданной площади, топологически эквивалентных правильному разбиению плоскости на квадраты, рассмотрено в [7]. В [8] предложен алгоритм сложности $O(n^2)$, позволяющий определить, порождает ли полимино площади n трансляционное разбиение плоскости.

Позднее алгоритм усовершенствован в [9]. В настоящей работе рассматривается задача о числе решётчатых разбиений плоскости на полимино заданной площади. Основным результатом является следующая теорема.

Теорема. Для числа $T(n)$ трансляционных разбиений плоскости на полимино заданной площади n справедлива оценка:

$$2^{n-3} + 2^{\lfloor \frac{n-3}{2} \rfloor} \leq T(n) \leq C(n+1)^3 (2,7)^{n+1}.$$

Нижняя оценка на число трансляционных разбиений на полимино заданной площади

Пусть n – площадь полимино. Возьмём произвольную последовательность из 0 и 1 длины $n-1$. Строим по ней ломаную следующим образом: 0 в последовательности соответствует сдвигу вправо, 1 – вверх. Далее сдвигаем ломаную на вектор $(-1; 1)$. Полученная ломаная с исходной не пересекаются. Дополняем их двумя уголками до образования полимино (рис. 1). Легко видеть, что получили полимино площади n .

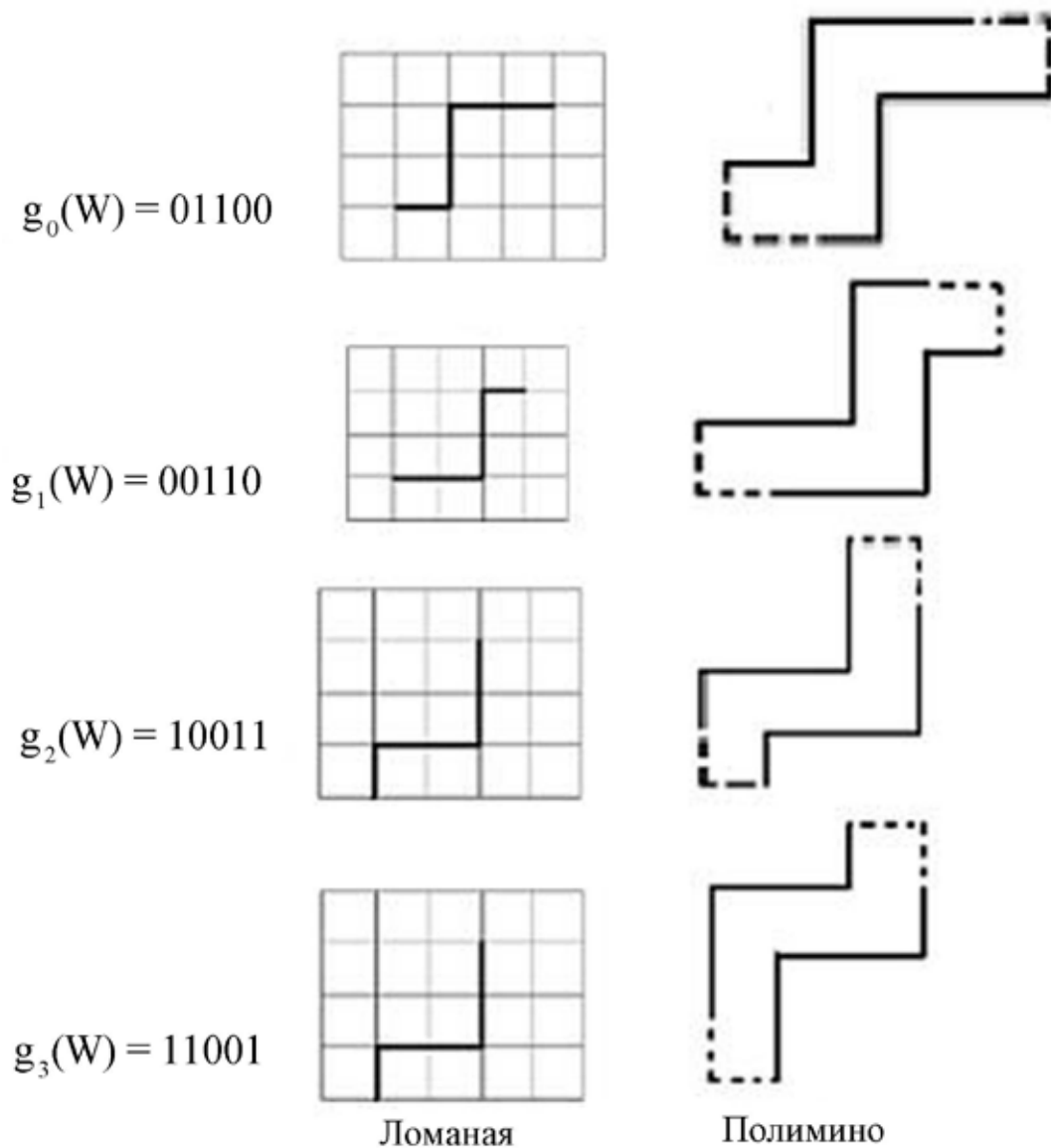


Рис. 1. Образование полимино из кода.

Все такие полимино дают трансляционные разбиения плоскости, причём при фиксированном n решётка у них одна и та же. Таких разбиений ровно 2^{n-1} . Но разбиения, полученные таким образом, могут повторяться. Чтобы найти нижнюю оценку на число неповторяющихся разбиений, достаточно поделить их количество 2^{n-1} на 8, поскольку из одного разбиения движениями (повороты на углы, кратные 90° , и отражения) больше 8 разбиений не сделать. Эту оценку можно улучшить. На множестве последовательностей из 0 и 1 определим действие группы G (рис. 2). Введём два порождающих преобразования: изменение порядка последовательности на обратный g_1 и инвертирование g_2 , то есть замена 0 на 1 и наоборот. В группе 4 элемента: тождественный, два порождающих и их композиция. Это известная коммутативная группа 4 порядка $D_2 = \{g_0 = e, g_1, g_2, g_3 = g_1 g_2\}$.

Утверждение: полимино порождают одинаковые разбиения тогда и только тогда, когда последовательности из 0 и 1 будут эквивалентны относительно группы G .

Для определения числа неповторяющихся разбиений нужно подсчитать число орбит группы. Для этого воспользуемся леммой Бернсайда.

Рис. 2. Действие группы G .

Лемма: число орбит группы есть суммарное число неподвижных точек её элементов, делённое на число элементов группы.

Напомним, что неподвижной точкой для данной задачи является последовательность заданной длины, не меняющаяся под действием преобразования. Сколько последовательностей перейдёт в себя под действием тождественного преобразования? Количество неподвижных точек, а именно, последовательностей длины $n-1$, при действии тождественного преобразования равно количеству последовательностей длины $n-1$, то есть 2^{n-1} . Сколько последовательностей перейдёт в себя под действием переписывания элементов в обратном порядке? Чтобы последовательность была неподвижным элементом, она должна быть симметрична. Половину последовательности выбираем произвольно, далее отражаем. Отдельно подсчитаем число симметричных последовательностей разной чётности. Если длина последовательности $n-1$ есть чётное число, то количество таких последовательностей равно $2^{(n-1)/2}$. Если длина последовательности $n-1$ есть нечётное число, то ко-

личество таких последовательностей равно $2^{(n-1)/2} \times 2 = 2^{n/2}$, поскольку в центре последовательности стоит либо 0, либо 1. При инверсии неподвижных точек нет.

Рассмотрим композицию инверсии и переписывания элементов последовательности в обратном порядке. Для нечетной длины $n-1$ неподвижных точек нет, так как центральный элемент обязательно меняется. Для четной длины $n-1$ последовательности, как и для второго преобразования, первую половину пишем произвольно, вторую отражаем и затем инвертируем. Число последовательностей, не меняющихся при этом преобразовании равно $2^{(n-1)/2}$. Далее сложим все неподвижные элементы при действии на них группы G . Число орбит группы по лемме Бернсайда равно: для $n-1$ нечетного $2^{(n-3)/2} + 2^{n/2-2}$; для $n-1$ четного $2^{n-3} + 2^{(n-3)/2}$. Непосредственной проверкой убеждаемся, что обе формулы могут быть записаны в виде $2^{n-3} + 2^{[(n-3)/2]}$.

Верхняя оценка на число трансляционных разбиений на полимино заданной площади

Вместо площади будем фиксировать периметр полимино. Значение периметра всегда четное число $2p$. Обозначим через $T_0(p)$ число трансляционных разбиений плоскости на полимино полупериметра p . Нужно понять, как устроено трансляционное разбиение. Для этого воспользуемся критерием [8]. Любую ломаную на клетчатой бумаге можно закодировать словом из 4 символов, например: 1 – вправо, 2 – вверх, 3 – влево, 4 – вниз. Ломаная AB , имеет направление от точки, расположенной левее и ниже, к точке расположенной правее и выше. Для незамкнутой ломаной это кодирование единственно, для замкнутой – нет. Для слова a определим обратное a' как код той же самой ломаной, взятый в обратном порядке. На рис. 3 дан пример полимино при $a = 411$, $b = 1$, $c = 2$. Тогда $a' = 332$, $b' = 3$, $c' = 4$. Пустое слово – это с топологической точки зрения разбиение на квадраты.

Теорема [8, 10]. Полимино даёт трансляционное разбиение тогда и только тогда, когда его граница представима в виде $abca'b'c'$ для некоторых a, b, c , причём слово c может быть пустым. Если таких представлений несколько, то каждому из них соответствует своё трансляционное разбиение.

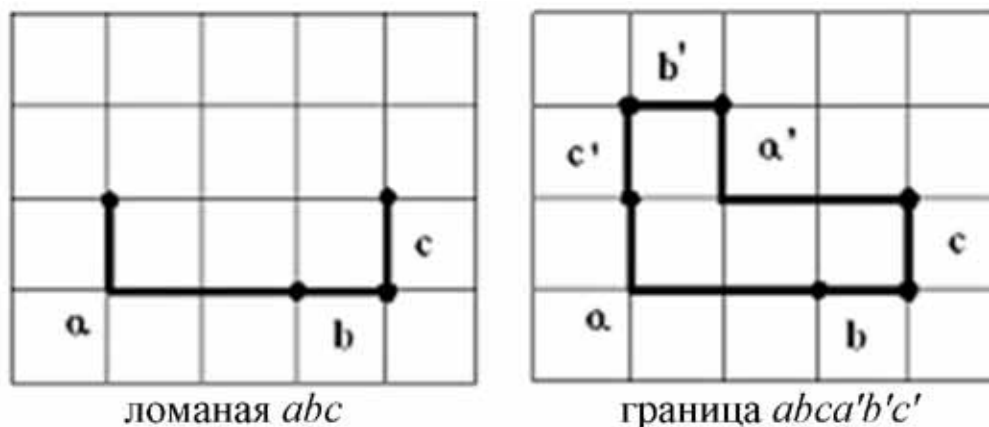


Рис. 3. Пояснения в тексте.

Разъясним геометрический смысл произведения abc . Это незамкнутая ломаная длины p без самопересечений (полимино имеет несамопересекающуюся границу) с отмеченными двумя точками – концами слов a и b . Точки нужны для того, чтобы мы могли найти границы слов a , b , c и построить сопряжённые слова, то есть восстановить полимино. Поэтому число трансляционных разбиений на полимино заданного периметра не превосходит числа таких ломаных. Берём полимино, дающее разбиение, у него есть код $abca'b'c'$, оставляем от него только abc . Нам нужно оценить сверху число несамопересекающихся ломаных длины p с двумя отмеченными точками, это и даст верхнюю оценку. Оценка точной не будет, поскольку при дописывании сопряжённых слов могут появляться самопересечения. Например, самопересечение возникает, если слова a и c совпадают.

Существует $p(p+1)/2$ способов отметить 2 точки на ломаной длины p , оценим их сверху выражением p^2 . Осталось оценить сверху число несамопересекающихся ломаных длины p . Такие ломаные известны под названием *self-avoiding walk* в квадратной сетке. Доказано [11], что их число не превосходит $C \times 2.7^p$. Итак, число $T_0(p) \leq C \times p^2 \times 2.7^p$.

Перейдём к площади. Имеет место связь площади и периметра $2p \leq 2n + 2$. Для получения верхней оценки числа $T_0(p)$ остаётся просуммировать предыдущую оценку по p от 1 до $n+1$:

$$T(n) \leq \sum_{p=1}^{n+1} T_0(p) \leq \sum_{p=1}^{n+1} C \cdot p^2 (2.7)^p.$$

Заменяя все слагаемые суммы на наибольшее, получим:

$$T(n) \leq C(n+1)^3 (2.7)^{n+1}$$

Теорема. Пусть $T_1(n)$ – число трансляционных разбиений плоскости на полимино площади n и полупериметра $p < 0.697n$. Тогда

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{T_1(n)}{T(n)} = 0$$

С учётом того, что $2\sqrt{n} \leq p \leq n+1$, эта теорема фактически означает, что почти все трансляционные разбиения плоскости порождаются полимино большого периметра.

Доказательство. Воспользуемся ранее доказанной оценкой $T_0(p) \leq C \cdot p^2 (2.7)^p$. Имеем

$$T_1(n) \leq \sum_{p=1}^{0.697n} T_0(p) \leq \sum_{p=1}^{0.697n} C \cdot p^2 (2.7)^p$$

Заменяя все слагаемые суммы на наибольшие, получим $T_1(n) \leq C \times (0.697n)^3 \times 2.7^{0.697n}$. Остаётся заметить, что $2.7^{0.697} < 2$. Используя аналогичные методы, можно доказать следующий результат.

Теорема. Для числа $T_c(n)$ решётчатых разбиений плоскости на центрально-симметричные полимино заданной площади n справедлива оценка:

$$C_1 \cdot \sqrt{2}^n \leq T_c(n) \leq C_2 \cdot n^2 \sqrt{2,68}^n$$

Список литературы

1. Голомб С. Полимино. М.: Мир, 1975.
2. Golomb S.W. Checkerboards and polyominoes // Amer. Math. Monthly. 1954. N 61. P. 672-682.
3. Гарднер М. Путешествие во времени. М.: Мир, 1990. 341 с.
4. Glenn C. Rhoads planar tilings by polyominoes, polyhexes, and polyiamonds // J. Comp. Appl. Math. 2005. N 174. P. 329-353.
5. Myers J. Polyomino, polyhex and polyiamond tiling // <http://www.srcf.ucam.org/jsm28/tiling/>
6. Малеев А.В. // Кристаллография. 2013. Т. 58. № 5. С. 749-756.
7. Brlek S., Frosini A., Rinaldi S. et al. Tilings by translation: enumeration by a rational language approach // Electronic J. of Combinatorics. 2006. N 13. R15.
8. Gambini I., Vuillon L. An algorithm for deciding if a polyomino tiles the plane by translations // Theoretical Informatics and Applications. 2007. V. 41. N 2. P. 147-155.
9. Brlek S., Provencal X., Fedou J.-M. On the tiling by translation problem // Discrete Applied Mathematics. 2009. N 157. P. 464-475.
10. Beauquier D., Nivat M. On translating one polyomino to tile the plane // Discrete Comput. Geom. 1991. N 6. P. 575-592.
11. Madras N., Slade G. The self-avoiding walk // Birkhauser. ISBN 978-0-8176-3891-7.

РАЗБИЕНИЕ ПЕНРОУЗА – МОДЕЛЬ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Шутов А.В., Малеев А.В.

Владимирский госуниверситет, г. Владимир, a1981@mail.ru, andr_mal@mail.ru

В работе предложен новый подход к построению и исследованию наиболее популярной математической модели квазикристаллов – разбиению Пенроуза. Он уточняет конструкцию Бааки, основанную на проектировании на плоскость 4-мерной решётки. Каждой вершине разбиения Пенроуза поставлен в соответствие параметр на комплексной плоскости. В терминах введенных параметров описаны ромбы разбиения и первые координационные окружения вершин. Показано, что граф вершин разбиения Пенроуза имеет самоподобный рост с формой роста в виде правильного 10-угольника.

В 2014 году исполняется 30 лет с момента выхода статьи [17], в которой сообщено об открытии нового класса твёрдых тел, получившего название квазикристаллов. Эти вещества, как и классические кристаллы, обладали дифракционной картиной, содержащей ярко выраженные Брэгговские пики, свидетельствовавшие о наличии дальнего порядка. Но полученная дифракционная картина обладала поворотной симметрией 10 порядка, не совместимой с 3-мерной решёткой. Квазикристаллы занимают промежуточное положение между упорядоченными кристаллами и аморфными структурами. За открытие квазикристаллов Д. Шехтман был удостоен Нобелевской премии по химии в 2011 г. Интересно, что его статья не была принята к печати дважды и в сокращённом виде, в конце концов, опубликована в соавторстве с известными специалистами И. Блехом, Д. Гратиасом и Дж. Каном. Несмотря на то, что с момента обнаружения квазикристаллов прошло немалое время, единой точки зрения на их природу нет. В связи с этим актуальна задача построения и исследования их моделей.

При математическом моделировании квазикристаллов обычно используется подход, получивший название «model set» и основанный на проектировании многомерных решёток в пространство меньшей размерности [14]. При этом вершины полученного точечного множества соответствуют расположению атомов квазикристалла. С точки зрения классической кристаллографии этот подход обладает недостатком: он не описывает связи между

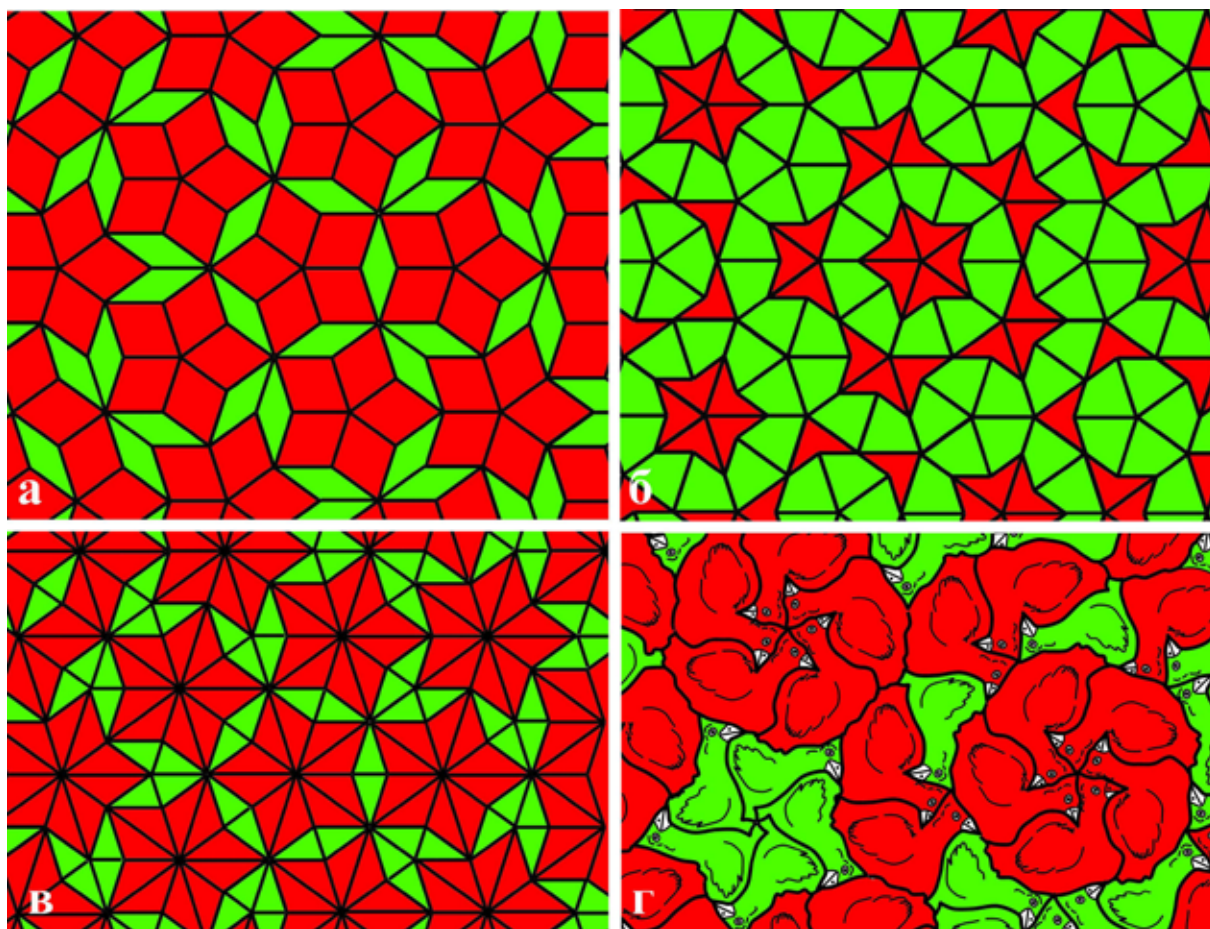


Рис. 1. Примеры разбиений Пенроуза.

атомами. Для их описания приходится использовать более сложные модели: разбиения, упаковки и графы. При этом 3-мерные модели обычно оказываются слишком сложными, приходится также рассматривать 1- и 2-мерные квазипериодические структуры. Наиболее известны разбиения Пенроуза. Они открыты в 1970-ых Р. Пенроузом при решении математической задачи о нахождении множества фигур, непериодически разбивающих плоскость [15]. Незадолго до Д. Шехтмана кристаллограф А. Мак-Кей экспериментально установил, что мозаики Пенроуза обладают дифракционным спектром с симметрией 10 порядка [13].

Существует несколько семейств разбиений, называемых мозаиками Пенроуза. В качестве плиток (прототипов), образующих разбиение, могут использоваться пара ромбов со сторонами длины 1 и острыми углами 36° и 72° (рис. 1 а), «змеи» и «наконечники» (рис. 1 б), треугольники Робинсона – пара равнобедренных треугольников с боковой стороной 1 и углами 36° , 36° , 108° и 72° , 72° , 36° [16] (рис. 1 в). Возможны и более экзотические варианты, такие как «куриное» разбиение Пенроуза [1] (рис. 1 г) или разбиения Пенроуза с фрактальными границами [8]. далее рассмотрим только первый вариант разбиений.

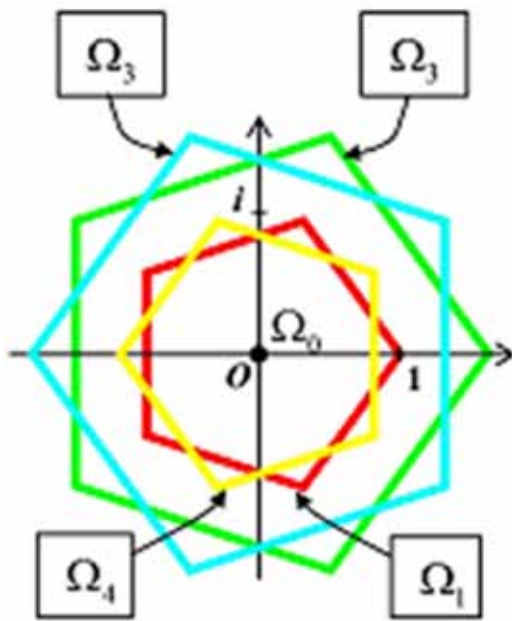


Рис. 2. Множества параметров вершин мозаики Пенроуза.

Известен ряд подходов к построению и изучению разбиений Пенроуза: использование локальных правил [15], обобщённые преобразования инфляции-дефляции [11], пентагрид-конструкция [12], проектирование из пространств высшей размерности, использование покрытия плоскости правильными 10-угольниками [10] и т.д. Самым удобным для компьютерного моделирования и получения математических результатов представляется подход М. Бааки [9], по сути – один из вариантов конструкции «model set». Она устроена следующим образом. Рассмотрим решётку L в пространстве размерности $n+m$ и две проекции $\pi_1: R^{n+m} \rightarrow R^n$ и $\pi_2: R^{n+m} \rightarrow R^m$. Пространство R^n будем называть физическим, а R^m – фазовым. Предположим,

что проекции решётки всюду плотны в каждом из пространств. Рассмотрим в фазовом пространстве множество W , которое будем называть окном. Тогда точечное множество $\Lambda_W = \{\pi_1(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in L, \pi_2(\mathbf{x}) \in W\}$ квазипериодическое и обладает точечным дифракционным спектром.

В варианте Бааки в качестве фазового пространства G рассматривается более сложный математический объект – прямое произведение множества комплексных чисел C на циклическую группу пятого порядка C_5 . Можно

считать, что точки из данного пространства имеют две координаты. Первая – комплексное число, вторая – целое число из множества. Точки из G можно складывать. Сложение определяется по координатам: обычное сложение комплексных чисел для первой координаты и остаток от деления суммы на 5 для второй. Физическое пространство R^2 также рассматривается как комплексная плоскость C . В качестве решетки L берётся целочисленная 4-мерная решётка, точки которой имеют координаты (h, j, k, l) , где h, j, k, l пробегает все возможные целые числа. Пусть теперь $\zeta = e^{2\pi i/5}$ – комплексный корень 5 степени из 1. Определим проекции π_1 и π_2 :

$$\pi_1((h, j, k, l)) = h + j\zeta + k\zeta^2 + l\zeta^3, \pi_2((h, j, k, l)) = (h + j\zeta^2 + k\zeta^4 + l\zeta, h + j + k + l \bmod 5).$$

Для завершения определения надо определить окно W . Пусть P – правильный 5-угольник на комплексной плоскости с вершинами $\{1, \zeta, \zeta^2, \zeta^3, \zeta^4\}$ и $\tau = (\sqrt{5} - 1)/2$. Тогда $W = \bigcup_{i=0}^4 (\Omega_i, i)$, где $\Omega_0 = \{0\}$, $\Omega_1 = P$, $\Omega_2 = -P/\tau$, $\Omega_3 = P/\tau$, $\Omega_4 = -P$. Множества параметров даны на рис. 2. Вторая координата параметра обозначена цветом: 0 – чёрный, 1 – красный, 2 – синий, 3 – зелёный, 4 – жёлтый.

Построенное при данном выборе проекций и окна модельное множество Λ_W по [9] совпадает с множеством вершин разбиений Пенроуза. При этом точка $\pi_2((h, j, k, l))$ в фазовом пространстве может рассматриваться как параметр вершины $\pi_1((h, j, k, l))$ из физического пространства. Соответствие между вершинами разбиения Пенроуза и параметрами взаимно-однозначное. Для построения рёбер используется утверждение: две вершины разбиения Пенроуза соединены ребром тогда и только тогда, когда расстояние между ними равно 1. Компьютерное исследование показало, что конструкция Бааки содежит ряд неточностей и приводит к «лишним вершинам».

На рис. 3 чёрными кружками даны точки, среди которых содержатся «лишние» вершины. Удалив их, превратим разбиение на рис. 3 в разбиение Пенроуза. Назовем эти точки особенными. Легко видеть, что их можно условно разделить на 2 типа: центральные, находящиеся вблизи начала координат (21 точка в центральной области рис. 3), и находящиеся в 10 полосах ограниченной ширины, называемых червями. Оказывается, можно выбросить часть особенных точек и порожденных ими рёбер, чтобы осталось разбиение Пенроуза. Параметры центральных особенных точек представляют собой 20 вершин четырёх 5-угольников, определяющих множества $\Omega_1 - \Omega_4$, и начало координат, определяющее множество Ω_0 . При этом существует 62 способа выбора 6 центральных особенных точек из 21, чтобы получить корректный центр разбиения Пенроуза. Параметры всех особенных точек, составляющих червей, находятся на границах 5-угольников, определяющих множества $\Omega_1 - \Omega_4$. Особенности точки, входящие в червя, разбиваются на пары – близкие точки. При этом их параметры противоположны. Если из каждой пары оставить по одной точке, получим множество вершин разбиения Пенроуза.

Результаты приводят к уточнению определения окна в методе Бааки: (1) Зафиксируем некоторое подмножество границ 5-угольников Ω_1 и Ω_2 , выбросив из их границ оставшиеся точки. (2) Оставим части границ двух оставшихся 5-угольников Ω_3 и Ω_4 по правилу: точка границы принадлежит окну тогда и только тогда, когда противоположная ей точка не принадлежит окну. (3) Одним из 62 возможных способов выберем 6 вершин из 21 в центре разбиения.

Нами был разработан компьютерный алгоритм для построения разбиений Пенроуза модифицированным методом Бааки [5]. Результат дан на рис.4. Цвет точки вновь определяется второй координатой его параметра. В [4, 18, 19] рассмотрен ряд квазипериодических разбиений плоскости, также описываемых на языке параметров: обобщенные разбиения Рози, разбиения, основанные на ступенчатых поверхностях. Их можно считать более простыми, чем разбиение Пенроуза, так как множества параметров для них являются одномерными. Большинство свойств разбиения: координационные окружения, тайлы, вершины, симметрии, самоподобия – допускают естественное описание на языке параметров. Возникает вопрос, насколько этот эффект переносится на разбиения Пенроуза.

Рассмотрим описания первых координационных окружений вершин разбиения Пенроуза. Под таковыми будем понимать множества вершин, соединённых с данной вершиной ребром. В силу симметрии множества параметров достаточно рассмотреть 2 типа вершин, например, красные и зе-

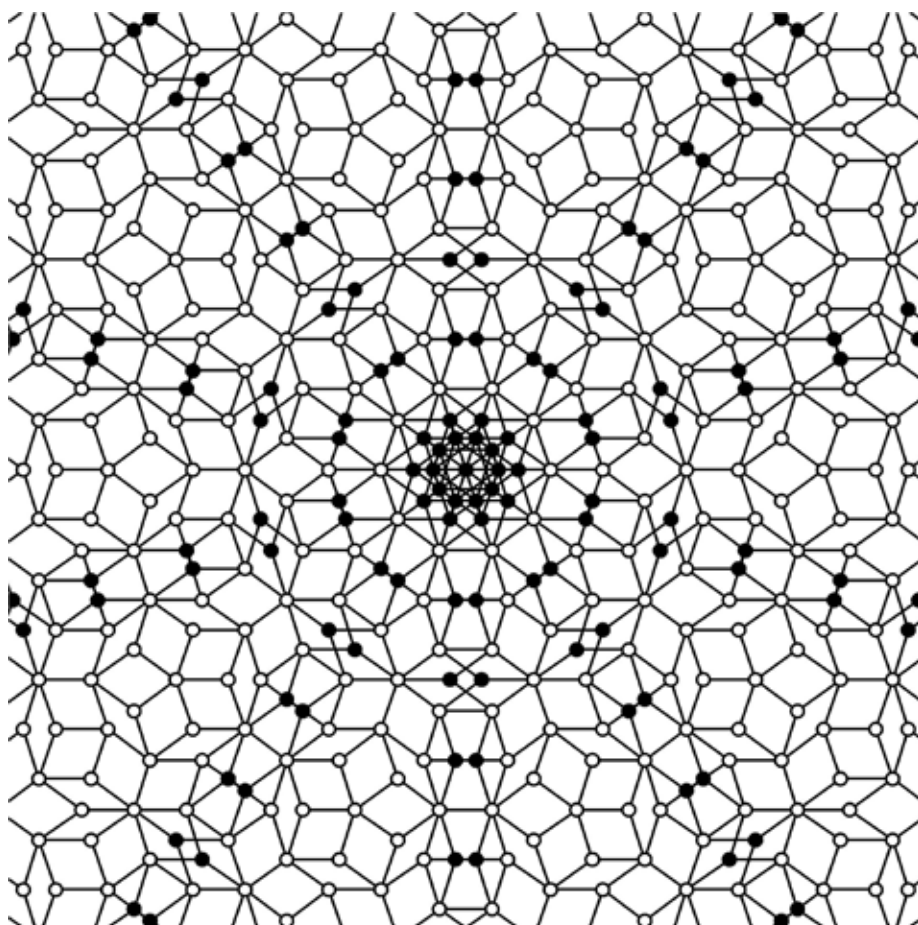


Рис. 3. Компьютерная реализация конструкции Бааки.

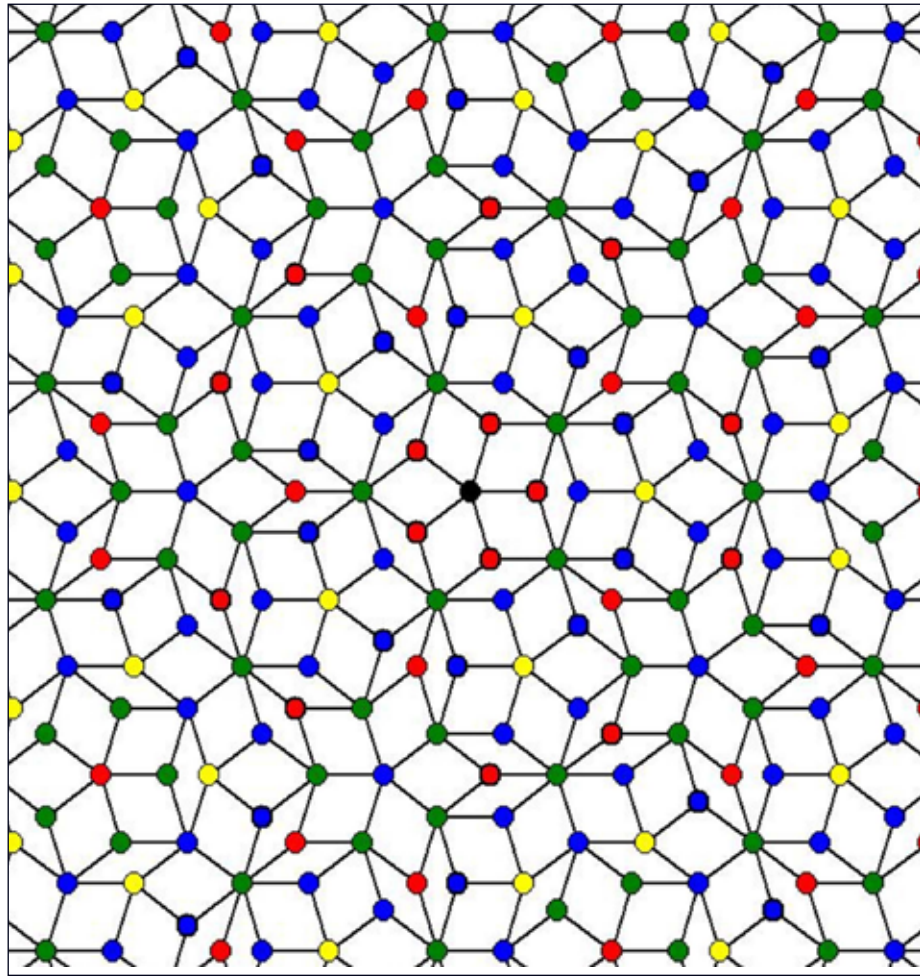


Рис. 4. Разбиение Пенроуза, построенное модифицированным методом Бааки.

лённые (им соответствуют множества параметров Ω_1 и Ω_3). Для красных вершин существует 11 типов трансляционно-неэквивалентных типов первых координационных окружений. Оказывается, что эти 11 типов однозначно определяются разбиением множества параметров (рис. 5). Точнее, 5-угольник Ω_1 разбивается на 11 подобластей (10 треугольных и 1 пятиугольную) таким образом, что вершины с параметрами, попавшими в одну подобласть, имеют один тип первого координационного окружения. Таким образом, координационное окружение точки однозначно определяется по значению параметра. Аналогично, для синих вершин есть 21 трансляционно неэквивалентный тип первых координационных окружений, также порождающий разбиение множества параметров. Подобное описание первых координационных окружений в терминах параметров ранее получило название сильной параметризации разбиений. Можно получить аналогичное описание координационных окружений произвольного порядка.

В [6] введена геометрическая модель послойного роста, основанная на последовательном присоединении координационных окружений. Модель изучалась в случае периодических упаковок, разбиений и графов, а также ряда 1-периодических и случайных графов и квазипериодических разбиений. Обзор современных результатов о послойном росте структур можно найти в [3, 7]. В случае графов послойный рост определяется следующим об-

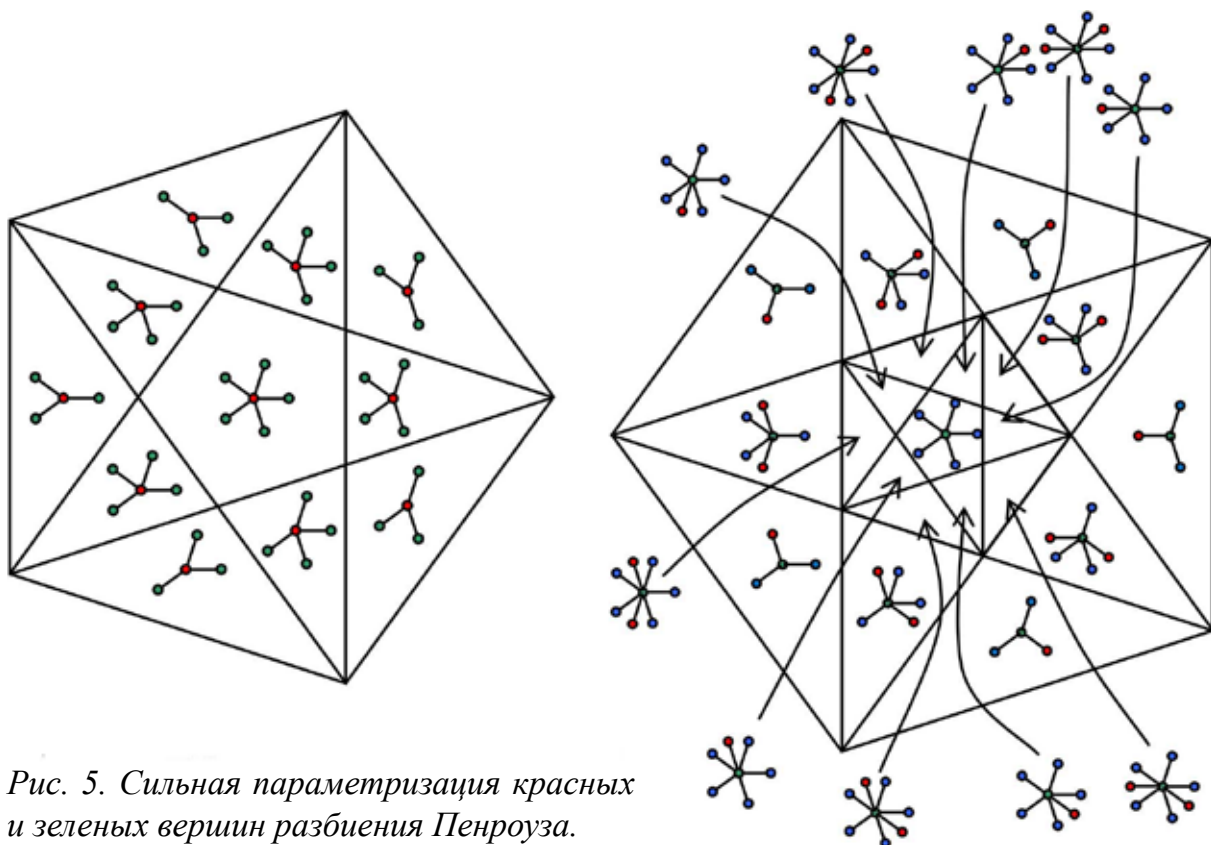


Рис. 5. Сильная параметризация красных и зеленых вершин разбиения Пенроуза.

разом. Рассмотрим произвольное множество V вершин графа и назовём его затравкой. Нулевое координационное окружение $eq(V, 0)$ по определению совпадает с затравкой. Последующие координационные окружения определяются индуктивно: координационное окружение $eq(V, n)$ состоит из вершин графа, соединённых ребром с вершинами из предыдущего координационного окружения $eq(V, n-1)$ и не входящих в координационные окружения с меньшими номерами. Если существует предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{eq(V, n)}{n}$, то он называется формой роста графа. Форма роста, если она существует, не зависит от выбора затравки V . Периодические структуры имеют многоугольные / многогранные формы роста. Аналогичный эффект обнаружен при исследовании роста квазипериодических разбиений. С другой стороны, при исследовании роста случайных графов экспериментально обнаружено появление криволинейных секторов [2].

Разработанная нами сильная параметризация графа вершин разбиения Пенроуза позволила предложить алгоритм послойного роста графа. Он реализован в виде компьютерной программы на языке Delphi. Результат работы дан на рис. 6. Таким образом, компьютерный эксперимент демонстрирует формирование феноменологического многоугольника роста графа разбиения Пенроуза. Анализ позволяет высказать гипотезу о том, что формой роста рассматриваемого графа является правильный 10-угольник, вершинами

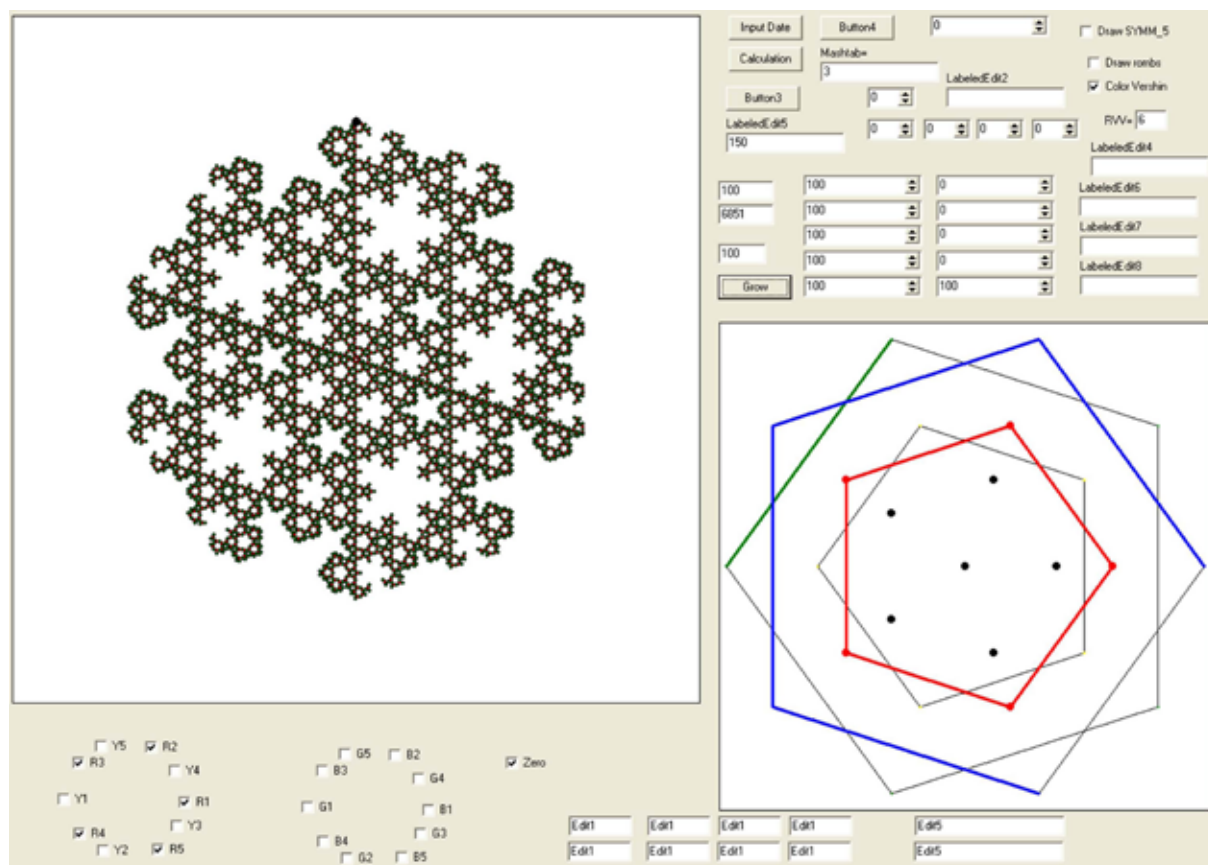


Рис. 7. Фрактальный послойный рост графа только красных и зелёных вершин разбиения Пенроуза.

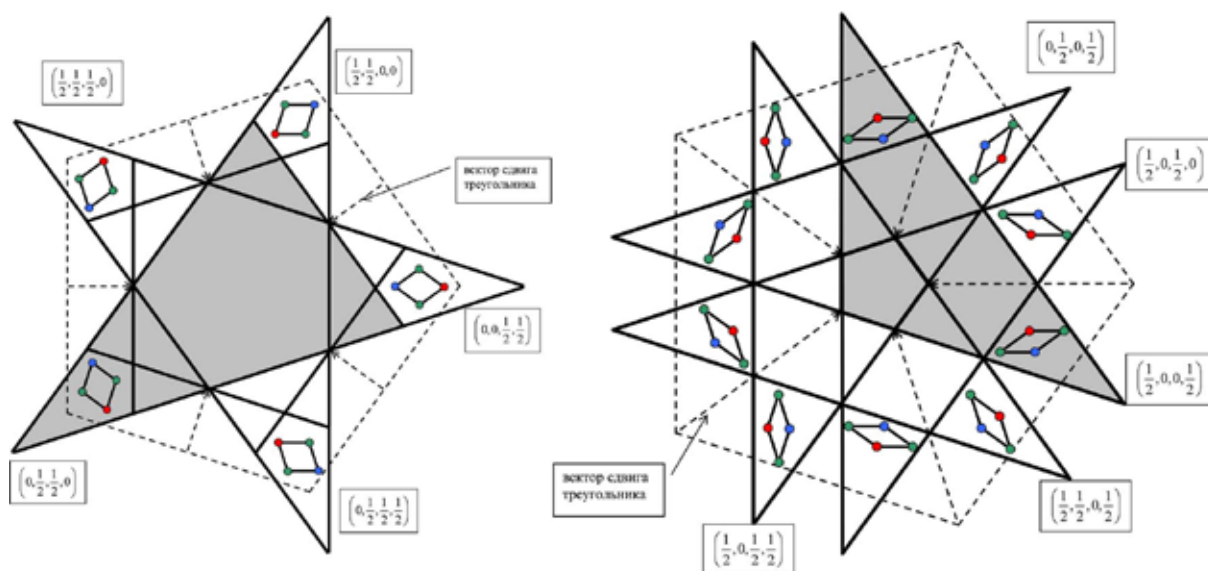


Рис. 8. Слабая параметризация ромбов разбиения Пенроуза.

Список литературы

1. Гарднер М. От мозаик Пенроуза к надежным шифрам. М.: Мир, 1993.
2. Журавлёв В.Г., Малеев А.В., Рау В.Г. и др. Рост плоских случайных графов и упаковок // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 6. С. 976-981.

3. Малеев А.В., Шутов А.В. Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов. Владимир: Транзит-Х, 2011. 107 с.
4. Малеев А.В., Шутов А.В., Журавлёв В.Г. Новые методы математического моделирования и исследования квазикристаллических структур // Тр. V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2009. С. 29-34.
5. Малеев А.В., Шутов А.В., Петросян Ж.Д. Программный комплекс для построения и исследования мозаик Пенроуза // Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2014618215. М.: Федеральная служба по интеллектуальной собственности (Роспатент), 2014.
6. Ray В.Г., Журавлёв В.Г., Ray Т.Ф. и др. Морфогенез кристаллических структур в методе дискретного моделирования // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 5. С. 793-796.
7. Шутов А.В., Малеев А.В., Журавлёв В.Г. Модель послойного роста разбиений и графов // Труды V Всерос. научн. школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2009. С. 126-130.
8. Bandt С., Gummelt P. // Aequ. math. 1997. V. 53. P. 295.
9. Baake M., Moody R.V. // Aperiodic 97. Ed. Verger-Gaugry J.-L., Singapore: World Scientific, 1998. P. 9.
10. Gummelt P. // Geometriae Dedicata. 1996. V. 62. P. 1.
11. De Bruijn N.G. // Indagationes mathematicae. 1990. V. 1. P. 201.
12. De Bruijn N.G. // Indagationes mathematicae. 1981. V. 43. P. 39.
13. MacKay, Alan L. Crystallography and the Penrose pattern // Physica. 1982. A114. P. 609-613.
14. Moody R.V. Model sets: a survey // From quasicrystals to more complex systems. Springer: Centre de physique les houches, 2000. 375 p.
15. Penrose R. // Bull. Inst. Mathematics and its Applications. 1974. V. 10. P. 266.
16. Robinson R.M. Comments on the Penrose tiles. Preprint. Berkeley: University of California, 1975.
17. Shechtman D., Blech I., Gratias D. et al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 1951.
18. Shutov A.V., Maleev A.V., Zhuravlev V.G. Complex quasiperiodic self-similar tilings: their parameterization, boundaries, complexity, growth and symmetry // Acta Cryst. 2010. A66. P. 427-437.
19. Shutov A.V., Maleev A.V. Quasiperiodic plane tilings based on stepped surfaces // Acta Cryst. 2008. A64. P. 376-382.



ГЕОЛОГИЯ И ГЕОФИЗИКА



БАЛАНС ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ В ГОРНЫХ ПОРОДАХ И РУДАХ

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, г. Апатиты, woyt@geoksc.apatity.ru

В статье предложены возможные решения обратной задачи компонентного баланса в горных породах и рудах (т.е. расчета концентраций компонентов в минеральных фазах по концентрациям компонентов и весовым долям фаз в породе или руде). Рассмотрены три метода (средних значений, последовательных приближений и наименьших квадратов), сформулированные в дискуссиях автора с проф. В.М. Изюитко. Приведены примеры расчётов.

Введение

Минералогам-технологам хорошо известна фундаментальная монография В.М. Изюитко, в которой, среди прочего, уделено внимание вопросам расчёта баланса руд: аналитическим методам определения содержаний химических элементов в минералах и минералов – в горной породе (руде) [1, с. 113, табл. 20]. Но возможна и обратная постановка задачи – оценить содержания элементов в минералах (что важно в генетическом и экономическом аспектах) по химическому и модальному составу породы (руды). Рассмотрение её с разных сторон привело к серии статей [2-6], рецензентом которых также была В.М. Напомним основные результаты.

Метод средних значений

Пусть $C(\alpha, \beta_i)$ – средние содержания элемента α в минеральных фазах β_i . Уравнение баланса для α имеет вид:

$$\sum \beta_i \times C(\alpha, \beta_i) = \alpha .$$

В общем случае для расчёта концентраций $C(\alpha, \beta_i)$ нужно иметь число уравнений, равное числу фаз β_i . Как правило, это условие легко выполнимо. Из n согласованных химических и количественно-минералогических анализов k можно выбрать C_n^k (число сочетаний из n по k) способами, это число растёт с n весьма быстро. Решение соответствующих систем уравнений даёт C_n^k концентраций $C(\alpha, \beta_i)$, образующих статистическое (в идеале – гауссово) распределение, математическое ожидание которого и предлагается принять за среднюю расчетную концентрацию $C(\alpha, \beta_i)$. Применим изложенный подход к данным табл. 1.

Для расчёта концентраций $C(\text{Pd}, \text{Pn})$, $C(\text{Pd}, \text{Cp})$, $C(\text{Pd}, \text{Po})$ и $C(\text{Pd}, \text{Sil})$ нужны 4 уравнения баланса вида:

$$\text{Pn} \times C(\text{Pd}, \text{Pn}) + \text{Cp} \times C(\text{Pd}, \text{Cp}) + \text{Po} \times C(\text{Pd}, \text{Po}) + \text{Sil} \times C(\text{Pd}, \text{Sil}) = \text{Pd} .$$

Данные табл. 1 позволяют записать 7 таких уравнений и выбрать 4 из них 35 способами. На рис. 1 даны результаты решения 35 систем уравнений, на рис. 2 – гистограммы расчётных концентраций в сравнении с гауссовыми (с теми же параметрами: средним и дисперсией) распределениями. Во всех случаях гипотеза о гауссовом распределении расчётных концентраций подтверждается критерием Колмогорова-Смирнова на уровне значимости 0.05. То есть, их разброс вызван совместным действием многих причин, среди которых важнейшие – погрешности анализов и непостоянные концентрации Pd в главных минералах от пробы к пробе. Но среди расчётных концентраций Pd в Cp и Po есть отдельные отрицательные значения (рис. 2), хотя ярко выраженные моды практически совпадают с положительными средними: $C(\text{Pd}, \text{Pn}) = 395$, $C(\text{Pd}, \text{Cp}) = 295$, $C(\text{Pd}, \text{Po}) = 1028$ г/т. В то же время, концентрации Pd в Sil почти всегда отрицательны. Вопрос об отрицательных концентрациях требует обсуждения.

Таблица 1. Содержания главных минералов и благородных металлов в рудных концентратах из Фёдорово-Панской интрузии, Кольский п-ов.

№ образца	Pn	Cp	Po	Sil	Ru	Rh	Pd	Os	Ir	Pt	Au
	вес. доли				г/т						
1	0.197	0.203	0.101	0.499		5.23	140.2		0.8	13.25	1.92
2	0.501	0.260	0.147	0.092	1.40	15.33	410.6	0.22	1.85	11.63	3.62
3	0.490	0.363	0.118	0.029	0.4	10.17	403.2	0.28	0.95	23.39	14.42
4	0.526	0.352	0.105	0.017	1.14	8.17	418.7	0.24	2.00	22.4	11.17
5	0.125	0.117	0.135	0.625	0.22	4.96	88.0	0.072	0.45	23.48	8.90
6	0.277	0.204	0.093	0.426	0.10	2.26	164.7	0.07	0.35	8.85	3.22
7	0.580	0.161	0.129	0.130	0.57	6.09	375.4	0.34	0.86	22.29	2.23

Примечание: Pn – пентландит, Cp – халькопирит, Po – пирротин, Sil – силикаты (в целом).

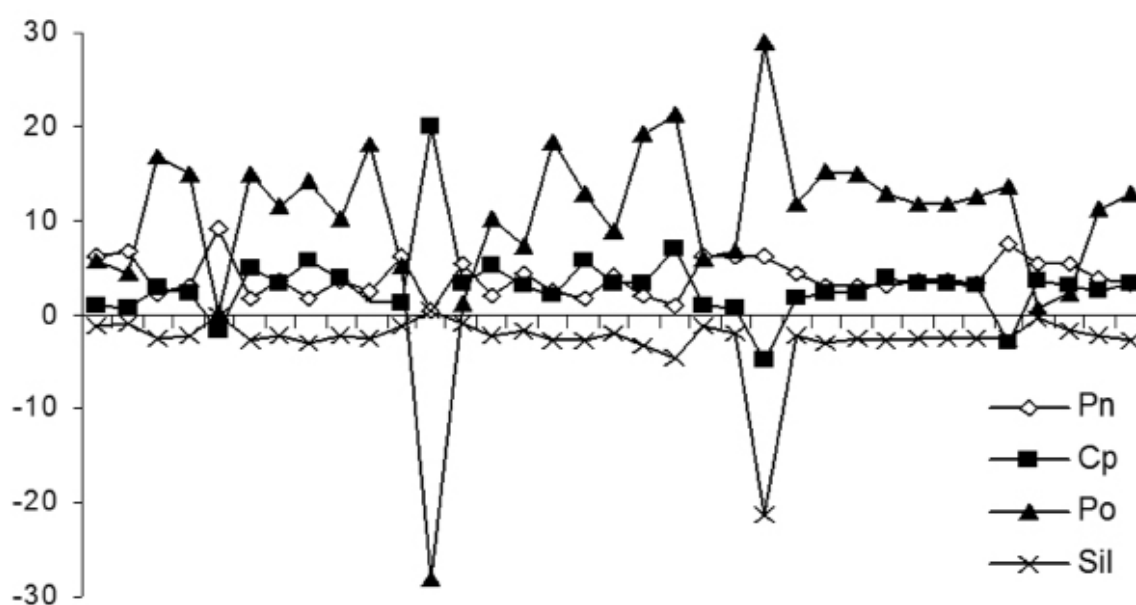


Рис. 1. Расчётные содержания Pd в главных минералах, $\times 100$ г/т.

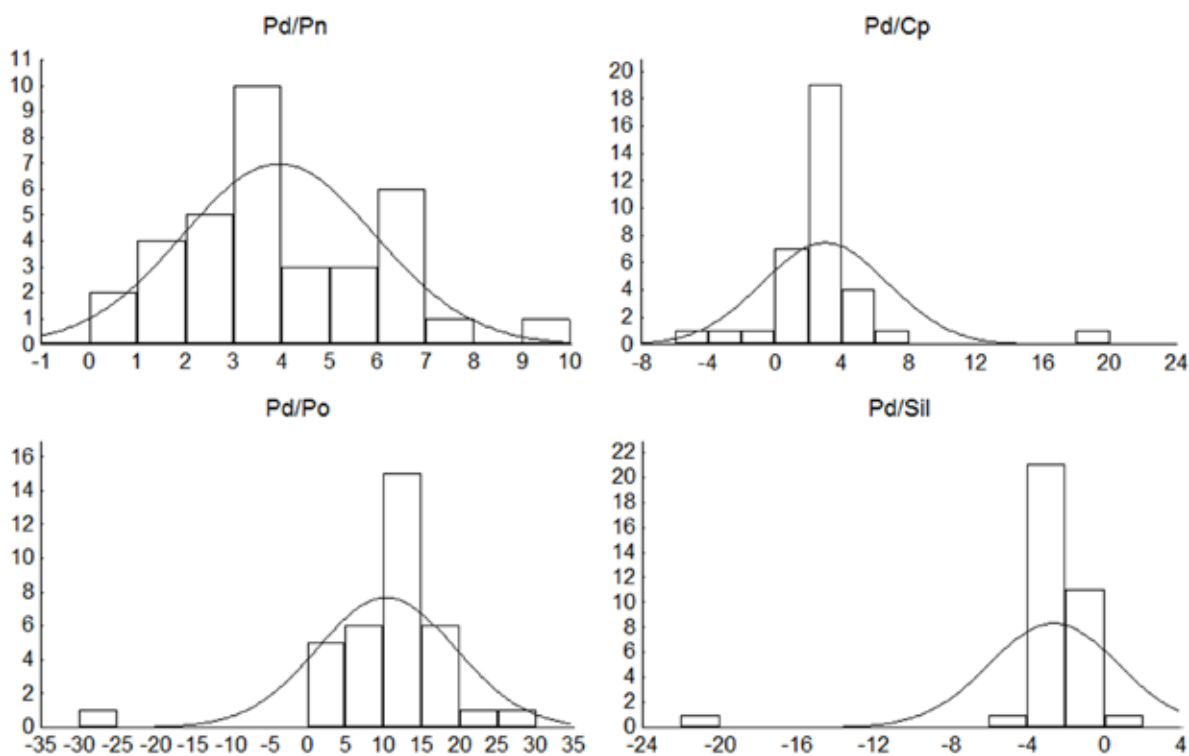


Рис. 2. Гистограммы содержаний Pd в главных минералах, $\times 100$ г/т.

Упрощая ситуацию, рассмотрим условную систему уравнений баланса для 3 главных минералов – Pn, Cp и Po – относительно Pd в них. Каждое уравнение задаёт плоскость в системе координат $C(\text{Pd}, \text{Pn})$, $C(\text{Pd}, \text{Cp})$, $C(\text{Pd}, \text{Po})$. Решением системы будет точка пересечения 3 плоскостей. Как показывает рис. 3, только в случае (а) она лежит в области положительных концентраций. В случае (б) хотя бы одна из них отрицательна. Это имеет место для табл. 1 с той разницей, что в ней учтены 4 минеральные фазы и для графической иллюстрации системы уравнений необходимо 4-мерное пространство. Сложность решения обратной задачи свелась к тому, что искомые концентрации ЭПГ и Au в главных минералах не являются константа-

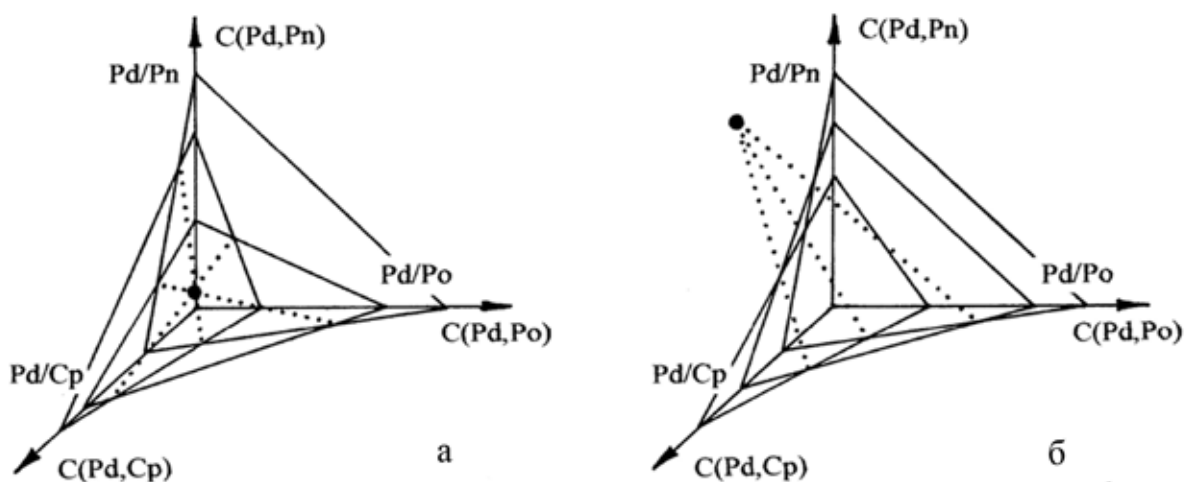


Рис. 3. Природа отрицательных концентраций при решении систем уравнений баланса.

ми даже в виде средних значений по каждой пробе. Каждая проба является выборкой из генеральной совокупности, неявно характеризующей её своим уравнением баланса. Искомые концентрации следует воспринимать как случайные величины. Поэтому каждая плоскость на рис. 3 – лишь множество значений концентраций, идеально удовлетворяющих уравнению баланса. Они должны быть дополнены полями рассеяния решений с убывающими – в направлении от плоскостей – доверительными вероятностями. Тогда и в неблагоприятном случае рис. 3б с некоторой вероятностью существует положительное решение любой системы уравнений баланса.

При относительно постоянных, но различных содержаниях элемента в каждом из главных минералов решения систем уравнений баланса должны показывать небольшое рассеяние относительно среднего. При значительной дисперсии содержаний решения систем уравнений тоже покажут высокую дисперсию. Здесь и возникает проблема отрицательных концентраций. При оценке расчётного среднего последние должны рассматриваться на тех же основаниях, что и положительные концентрации. Неоспоримое свидетельство противоречивости исходных данных – положение практически всего распределения расчётных концентраций в отрицательной области, как это имеет место для Pd в Sil (рис. 2). Если эксперимент планируется заранее, то можно рекомендовать следующее. Положение точки пересечения плоскостей в области положительных концентраций обеспечивается их резко различными ориентациями (рис. 3). Но они задаются величинами отсекаемых по осям координат отрезков Pd/Pn, Pd/Cr и Pd/Po. Так как значение валового содержания Pd в пробе во всех трёх отношениях одинаково, следует предусмотреть резко различные весовые доли главных минералов Pn, Cr и Po в пробах.

Руды Фёдорово-Панского интрузива богаты самостоятельными минералами ЭПГ, спорадически рассеянными в виде мелких включений в главных минералах без ярко выраженных предпочтений. Решение системы уравнений баланса не может явно указать на присутствие самостоятельных минеральных фаз ЭПГ. Косвенно на это может указывать значительный разброс расчётных концентраций в положительную и отрицательную стороны, что и наблюдается в рассмотренном примере. Совместное рассмотрение результатов весового количественно-минералогического и химического анализов в форме систем уравнений баланса позволяет проверить их непротиворечивость, на которую указывает гауссово распределение расчётных концентраций с положительными средними. Отношение последних даёт расчётный коэффициент распределения элемента между минеральными фазами. Неустойчивые концентрации ЭПГ и Au в главных минеральных фазах создают эффект отрицательных расчётных значений. Планируя эксперимент, целесообразно предусмотреть их резко различные весовые доли в анализируемых пробах.

Метод последовательных приближений

Этот метод позволяет избавиться от аномальных расчетных значений $C(\alpha, \beta_i)$. Он состоит в том, что из совокупности последовательно устраняется то значение, которое наиболее удалено от среднего, рассчитанного после предыдущей итерации. Для его проверки поставлен следующий эксперимент. Из монофракций природных минералов (кварц, диопсид, биотит, плагиоклаз и гранат) изготовлены смеси, состав которых дан в табл. 2.

Таблица 2. Смеси мономинеральных фракций, мг (вес. %).

№	Кварц	Диопсид	Биотит	Плагиоклаз	Гранат	Σ
1	13.83(69.81)	1.55 (7.84)	1.43 (7.22)	1.44 (7.27)	1.56 (7.87)	19.81
2	12.0 (60)	2.01(10.05)	2.14 (10.7)	1.97 (9.85)	1.88 (9.4)	20.0
3	9.91 (49.47)	2.7 (13.48)	2.44 (12.18)	2.6 (12.98)	2.38 (11.88)	20.03
4	8.19 (40.77)	1.86 (9.26)	1.93 (9.61)	8.11 (40.37)	0	20.09
5	5.92 (30.22)	3.05 (15.05)	8.25 (40.72)	0	3.04 (15.0)	20.26
6	4.13 (19.98)	12.25 (59.26)	0	2.25 (11.1)	2.04 (9.87)	20.67
7	2.09 (11.43)	0	3.9 (19.47)	6.02 (30.05)	8.02 (40.04)	20.03
8	0	5.22 (27.27)	4.88 (24.56)	4.97 (25.01)	4.8 (24.16)	19.87
9	20.27 (100)	0	0	0	0	20.27
10	0	20.2 (100)	0	0	0	20.2
11	0	0	20.26 (100)	0	0	20.26
12	0	0	0	19.86 (100)	0	19.86
13	0	0	0	0	20.14 (100)	20.14

Таблица 3. Результаты анализа, вес. %. Номера смесей соответствуют табл. 2.

№ п/п	Fe_2O_3	CaO	MgO	SiO_2	Al_2O_3
1	5.22	2.02	2.01	83.51	5.54
2	6.90	2.69	2.46	80.0	5.40
3	8.09	3.64	3.40	74.20	6.99
4	3.13	3.22	1.86	76.36	10.10
5	17.17	3.75	5.67	57.71	10.02
6	5.87	14.23	10.76	63.17	4.70
7	20.48	1.04	2.53	54.15	16.64
8	16.64	6.72	6.77	48.62	13.90
9	0	0.03	0	100.53	0
10	3.69	24.66	15.74	53.46	1.24
11	27.13	0.03	6.86	36.65	15.40
12	0	2.84	0.01	66.78	21.04
13	36.25	0.62	3.47	39.72	20.01

Химическим анализом в них установлены концентрации главных петрогенных оксидов: SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO и MgO (табл. 3). Они же были рассчитаны из систем уравнений баланса. При составлении систем брались только

уравнения, характеризующие смеси, содержащие все минеральные фазы. В результате получено 56 (число сочетаний из 8 по 5) систем уравнений и 56 значений концентраций каждого оксида в каждом из минералов. Они показывают большой разброс, что обсуждалось выше.

На рис. 4 показана процедура для SiO_2 в каждой из минеральных фаз, на рис. 5 – для каждого из оксидов в гранате. Расчётные концентрации SiO_2 в кварце сходятся к величине 100.43 %, по данным химического анализа (далее в скобках) – 100.53 %, диопсиде – 52.98 (53.46), биотите – 32.19 (36.65), плагиоклазе – 66.98 (66.78), гранате – 41.29 (39.72). Аналогично, в гранате: Fe_2O_3 – 38.07 (36.25), CaO – -0.05 (0.62), MgO – 4.62 (3.47), Al_2O_3 – 17.90 (20.01). Во всех случаях расхождение не превышает 5 %, что представляется хорошим результатом для оценочного расчётного метода.

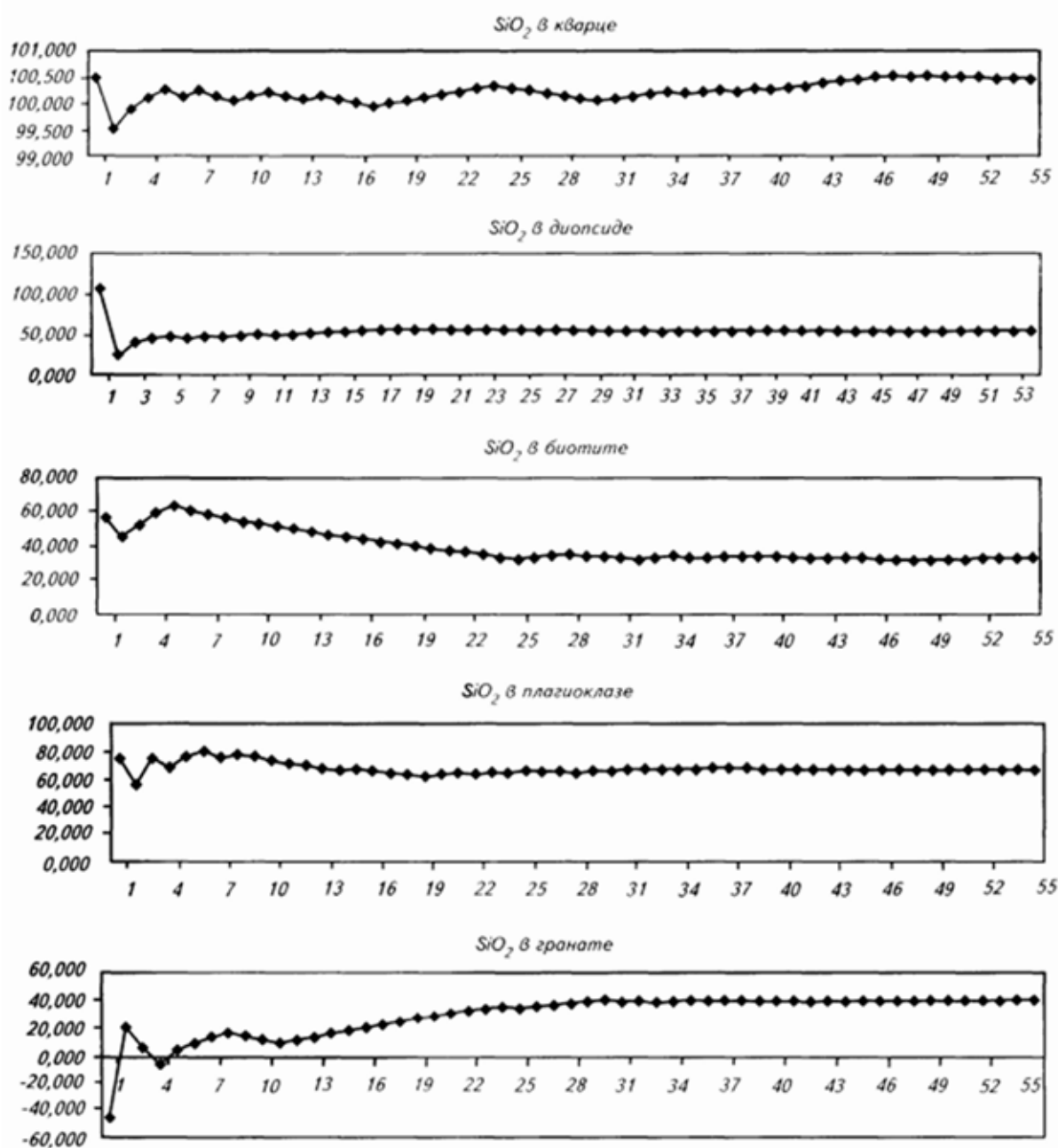


Рис. 4. Процедура последовательного приближения для SiO_2 в минеральных фазах.

В проведенном эксперименте весовые доли минеральных фаз в смесях были известны. Далее для реальных пород и руд их предполагается рассчитывать через объёмные доли, измеренные под микроскопом. Следует установить, какую долю погрешности расчётного значения концентрации вносит каждая из стадий (определение весовых долей фаз и концентраций элементов в руде). Не ясно также, можно ли по виду решений распознать наличие в руде самостоятельной минеральной фазы, не учтённой уравнениями баланса.

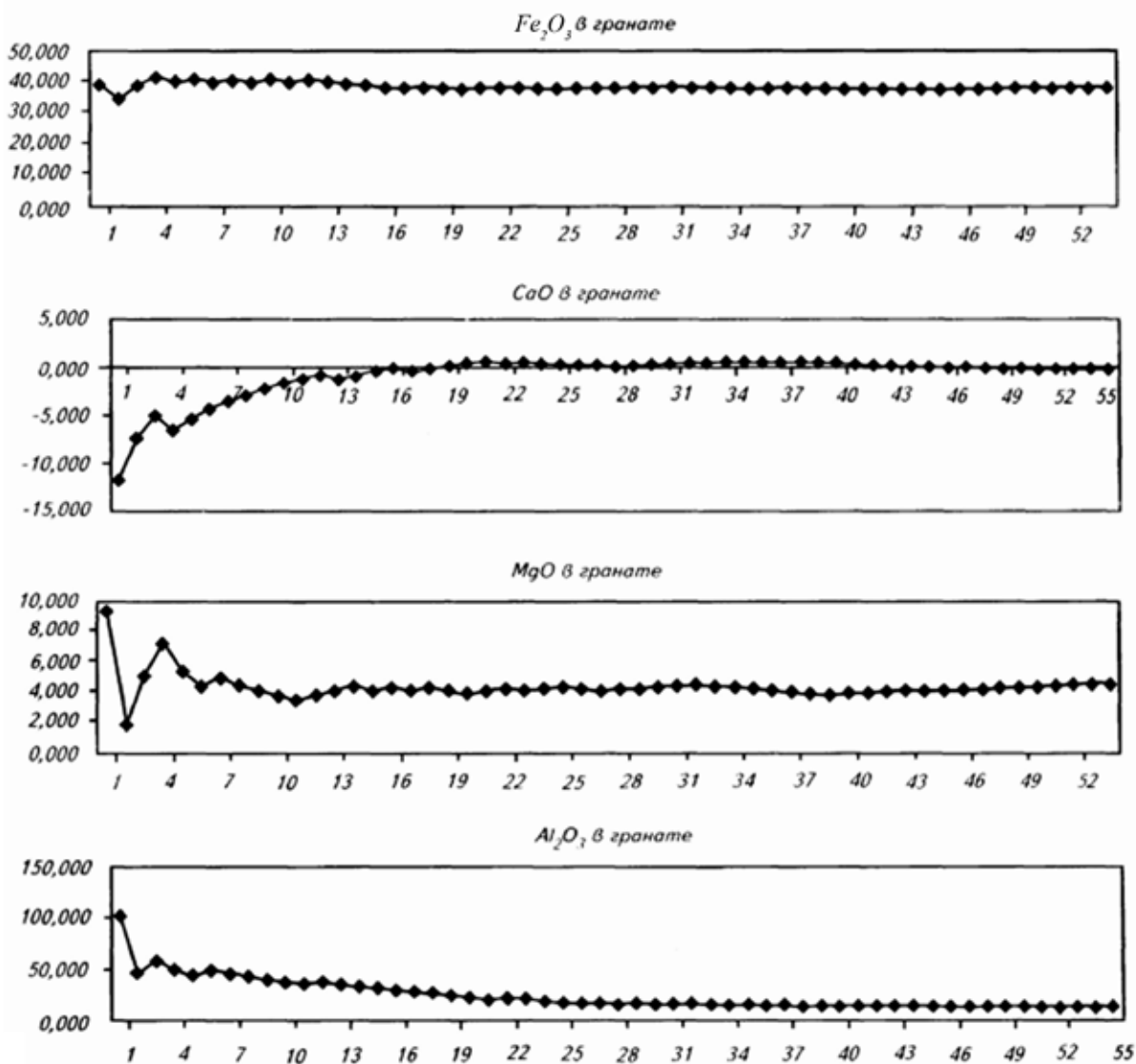


Рис. 5. Процедура последовательного приближения для оксидов в гранате (SiO_2 см. на рис. 4).

Метод наименьших квадратов

Разделив уравнения баланса для каждого элемента на свой коэффициент $(\sum \beta_i^2)^{1/2}$, получим тождественную систему:

$$\delta_{ij} c_j - c_{(i)} = 0, \quad i = 1, \dots, k; \quad j = 1, \dots, n. \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & + 2 \delta_{k_1} [\delta_{k_1} c_1 + \delta_{k_2} c_2 + \dots + \delta_{k_n} c_n - c_{(k)}] = 0 \\ & \dots\dots\dots \\ \partial \Sigma / \partial c_n &= 2 \delta_{l_n} [\delta_{l_1} c_1 + \delta_{l_2} c_2 + \dots + \delta_{l_n} c_n - c_{(l)}] + \dots \\ & + 2 \delta_{k_n} [\delta_{k_1} c_1 + \delta_{k_2} c_2 + \dots + \delta_{k_n} c_n - c_{(k)}] = 0 , \end{aligned}$$

и группируя члены уравнений при $c_1, \dots, c_n$, представим систему в матричной форме:

$$\begin{bmatrix} \langle \delta_{i1}, \delta_{i1} \rangle & \dots & \langle \delta_{i1}, \delta_{in} \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle \delta_{in}, \delta_{i1} \rangle & \dots & \langle \delta_{in}, \delta_{in} \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \dots \\ \mathbf{c}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \delta_{i1}, \mathbf{c}_{(i)} \rangle \\ \dots \\ \langle \delta_{in}, \mathbf{c}_{(i)} \rangle \end{bmatrix} \quad (3)$$

где скобками $\langle \dots \rangle$ обозначены скалярные произведения, например:

$$\langle \delta_{i1}, \delta_{in} \rangle = \delta_{i1} \delta_{1n} + \delta_{i2} \delta_{2n} + \dots + \delta_{ik} \delta_{kn},$$

$$\langle \delta_{ij}, \mathbf{c}_i \rangle = \delta_{11} \mathbf{c}_{(1)} + \delta_{21} \mathbf{c}_{(2)} + \dots + \delta_{k1} \mathbf{c}_{(k)} .$$

Система (3) легко разрешается относительно концентраций $c_1, \dots, c_n$. Нетрудно видеть, что все вторые производные положительны. Тем самым найденные концентрации обеспечивают минимум суммы квадратов расстояний $d_1^2 + \dots + d_k^2$.

Таблица 4. Концентрации компонентов в минеральных фазах,
расчёт / хим. анализ, вес. %.

	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SiO ₂	Al ₂ O ₃
Q	0.04/0.0	0.31/0.03	-0.06/0.0	100.21/100.53	0.58/0.0
Di	3.39/3.69	23.16/24.66	17.61/15.74	53.09/53.46	1.43/1.24
Bi	26.89/27.13	-0.07/0.03	5.82/6.86	32.88/36.65	16.96/15.40
Pl	0.40/0.0	2.12/2.84	-0.95/0.01	67.49/66.78	19.88/21.04
G	37.59/36.25	0.62/0.62	3.95/3.47	39.67/39.72	18.01/20.01

Примечание: Q – кварц, Di – диопсид, Bi – биотит, Pl – плагиоклаз, G – гранат.

Для проверки метода использованы искусственные смеси природных минералов, рассмотренные выше. Весовые доли β_i минеральных фаз и концентрации элементов в смесях были известны. Решения системы (3) в сравнении с данными химического анализа для каждой из минеральных фаз даны в табл. 4. Расхождение составляет не более 3.77 % (SiO_2 в биотите), что представляется хорошей оценкой для расчётного метода. В табл. 5 даны концентрации SiO_2 во всех минеральных фазах и всех компонентов в гранате, рассчитанные методом последовательных приближений. Они близки к результатам, найденным методом наименьших квадратов.

Таблица 5. Концентрации компонентов в минеральных фазах (метод последовательных приближений, вес. %).

	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	Al ₂ O ₃
Q	100.43	не рассчитывались			
Di	52.97				
Bi	32.19				
Pl	66.98				
G	41.29	38.07	-0.05	4.62	17.89

Нельзя ли улучшить сходимость результатов, модифицировав метод последовательных приближений? В табл. 6 даны расстояния $d_1, \dots, d_8$ от точки наилучшего решения системы (3) до каждой гиперплоскости, заданной уравнениями баланса (максимальные расстояния для каждого из компонентов подчеркнуты). В данном случае нет «плохой» гиперплоскости, отстоящей от точки наилучшего решения системы (3) аномально далеко по всем координатам. Только в этом случае имело бы смысл исключить из рассмотрения соответствующее уравнение баланса, заподозрив в нём грубую ошибку определения коэффициентов Δ_{ij} или C_i .

Таблица 6. Расстояния $d_1, \dots, d_8$ от точки наилучшего решения системы (3) до гиперплоскостей, заданных уравнениями баланса.

	d_1	d_2	d_3	d_4	d_5	d_6	d_7	d_8
Fe ₂ O ₃	0.012	-0.135	<u>0.351</u>	-0.091	-0.117	-0.132	-0.131	0.191
CaO	0.279	0.109	-0.037	-0.153	-0.218	-0.215	-0.242	<u>0.481</u>
MgO	-0.023	0.262	0.008	-0.124	-0.156	-0.066	-0.199	<u>0.334</u>
SiO ₂	<u>1.326</u>	-1.169	0.145	-0.305	-0.234	0.563	-0.732	1.059
Al ₂ O ₃	<u>-1.295</u>	0.869	0.520	-0.117	-0.047	0.396	-0.184	-0.024

Таким образом, предложенный выше метод наименьших квадратов для решения обратной задачи расчёта баланса компонентов в горных породах и рудах можно считать сопоставимым по эффективности с методом последовательных приближений. Но метод наименьших квадратов требует меньших вычислений, что является существенным преимуществом.

Заключение

Удивительно, насколько нетривиальной и ранее не изученной оказалась обратная задача расчёта баланса – нахождение концентраций элементов в минералах по их концентрациям, а также массовым долям минералов в породах и рудах. Не все теоретические аспекты задачи изучены, не говоря уже о методических приёмах определения исходных величин. Наиболее интересными представляются разложение суммарной погрешности на составля-

ющие, обусловленные различными факторами, и разработка методических приёмов их минимизации. Это – лишь одно из направлений дальнейших исследований, определившееся в дискуссиях автора с В.М. Изойтко.

Список литературы

1. Изойтко В.М. Технологическая минералогия и оценка руд. СПб.: Наука, 1997. 582 с.
2. Балабонин Н.Л., Субботин В.В., Скиба В.И. и др. Формы нахождения и баланс благородных металлов в рудах Фёдорово-Панской интрузии, Кольский п-ов // Обогащение руд. 1998. № 6. С. 24-30.
3. Войтеховский Ю.Л., Скиба В.И. Баланс благородных металлов в рудах Фёдорово-Панской интрузии, Кольский п-ов // Обогащение руд. 2001. № 6. С. 11-13.
4. Войтеховский Ю.Л., Скиба В.И. Баланс элементов в горных породах и рудах. Решение обратной задачи для искусственных смесей природных минералов // Обогащение руд. 2002. № 3. С. 27-29.
5. Войтеховский Ю.Л., Скиба В.И. Баланс элементов в горных породах и рудах. Решение обратной задачи методом наименьших квадратов // Обогащение руд. 2003. № 1. С. 25-27.
6. Скиба В.И., Войтеховский Ю.Л., Гавриленко Б.В. Баланс элементов в горных породах и рудах. Распределение благородных металлов в хромитовых рудах Сопчеозёрского месторождения, Кольский п-ов // Обогащение руд. 2004. № 4. С. 31-34.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Готовя доклад к «Чтениям памяти П.Н. Чирвинского» (г. Пермь, 20-21 января 2015 г.), я заглянул в папку с материалами о жизни этого замечательного геолога, в 1931-1941 гг. работавшего в Хибинах, и обнаружил сделанную много лет назад ксерокопию его статьи «Забытый способ Брю вычисления количественного минералогического состава горных пород». В виде отдельного оттиска из «Известий Донского политехнического института (т. XI) она была переиздана под титулом Горно-технической секции Политехнического общества при Донском политехническом институте в 1928 г., подарена автором акад. А.Е. Ферсману и сохранилась в его личном фонде в Научной библиотеке Кольского НЦ РАН (рис.). Казалось бы, почти через полтора века после публикации статьи А.С. Брю его способ должен стать вовсе архаичным. Между тем, в нём использован метод детерминантов решения систем линейных уравнений, использованный мной в предыдущей статье. Это сходство приёмов перебрасывает мост через время. Что до П.Н. Чирвинского, меня всё более восхищает его энциклопедичность. Судите сами, ему принадлежат столь различные по темам кни-

ги: «Искусственное получение минералов в XIX столетии», «Палласиты, их минералого-химический состав, положение в ряду других метеоритов и вопросы происхождения», «Снег и снегозадержание»... Не прошёл он и мимо оригинального применения линейной алгебры в количественном минералогическом анализе горных пород. Полагаю, читатели сборника с удовольствием прочтут эту статью П.Н. Чирвинского, столь же забытую, как и способ Брио. Орфография и пунктуация сохранены, опечатки устранены.

Гл. редактор



Забытый способ А.С. Брио вычисления количественного минералогического состава горных пород. Коэффициенты А.С. Брио, аналогичные атомным числам Розенбуша

П.Н. Чирвинский

Способ этот изложен был русским петрографом А.С. Брио в Харькове в неизвестной не только на западе, но мало известной в России его интересной и обстоятельной работе: «Химико-минералогические исследования некоторых из представителей Днепровских пород», напечатанной в 1871 г.¹

Способ этот был им применён при вычислении минералогического состава гранитов, которые он анализировал, равно как и анализировал отдельно их главнейшие минералы – ортоклаз (% содерж<ание> его обозначается ниже буквою F), олигоклаз (O), биотит (G), для кварца (Q) принимается теоретический состав – чистый кремнезём. Обычно теперь, если хотят вычислить количественный минералогический состав биотитового гранита, опираются прежде всего на сопоставление содержания магнезии в граните и в биотите, ибо из минералов только последний содержит в себе эту составную часть². При малых числах магнезии в породе могут быть значительные ошибки в определении содержания биотита, что в свою очередь должно отразиться на определении содержания в породе полевых шпатов и кварца. Таким образом как в самом граните, так и в соответственном биотите должно быть обращено особое внимание на точность определения магния. Подобное же явление будет иметь место и для породы, содержащей из магнезиальных силикатов, напр., только одну роговую обманку, или один какой-либо пироксен. Способ Брио даёт больше гарантии точности вычисления, ибо сразу опирается на несколько компонентов силикатов, входящих в состав горной породы. Способ Брио я изложу здесь с небольшими изменениями в форме.

Положим, что горная порода А состоит из четырёх частей I, II, III, IV. Процентное содержание этих частей в породе (напр. граните) выражается соответственными числами, так что в 100 частях F, O, G, Q породы содержится

$$\left. \begin{array}{l} \text{I} \\ \text{II} \\ \text{III} \\ \text{IV} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{F частей} \\ \text{O частей} \\ \text{G частей} \\ \text{Q частей} \end{array} \quad \text{F} + \text{O} + \text{G} + \text{Q} = 100$$

¹ Труды Общества испытателей природы при Харьковском университете, т. V, Харьков, 1871, 56 стр. *in quarto*. Об этой забытой и в России работе Брио говорит Ф.Ю. Левинсон-Лессинг в своей книге «Успехи петрографии в России», вышедшей в 1923 г. (стр. 71-73).

² Как это делать, подробно разбирается, напр., в моей книге «Количественный минералогический и химический состав гранитов и грейзенов», Москва, 1911, стр. 11-17.

Пусть далее в нашу породу и части I, II, III входят элементы k, l, m, которых нет в части IV (значит для гранита нельзя брать общим компонентом кремнезём, но можно, напр., как берёт Брио, окись алюминия, окись железа и окись калия, ибо ни одна из этих составных частей не входит в кварц). Пусть процентное содержание этих элементов таково

k	{	в	A	I	II	III
		содержится % ₁₀₀	B	b	b'	b''
l	{	в	A	I	II	III
		содержится % ₁₀₀	C	c	c'	c''
m	{	в	A	I	II	III
		содержится % ₁₀₀	D	d	d'	d''

Тогда в 100 частях тела A содержится элемента k

		В частях
в F	части I	$\frac{b}{100} F$
в O	части II	$\frac{b'}{100} O$
в G	части III	$\frac{b''}{100} G$
в Q	части IV	элемента k нет.

Имеем очевидное равенство

$$\frac{b}{100} F + \frac{b'}{100} O + \frac{b''}{100} G = B, \text{ откуда}$$

$$b F + b' O + b'' G = 100 B.$$

Точно так же подсчитывая содержание элементов l и m 100 частях A или в F, O, G частях частей I, II, III, получим ещё два аналогичные уравнения. В результате приходим к системе

$$\left. \begin{aligned} b F + b' O + b'' G &= 100 B \\ c F + c' O + c'' G &= 100 C \\ d F + d' O + d'' G &= 100 D \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{из которых находим} \\ F, O, G \end{array}$$

$$F = \frac{100 \begin{vmatrix} B & b' & b'' \\ C & c' & c'' \\ D & d' & d'' \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} b & b' & b'' \\ c & c' & c'' \\ d & d' & d'' \end{vmatrix}} = \frac{100 [B(c'd'' - c''d') - C(b'd'' - b''d') + D(b'c'' - c'b'')] }{bc'd'' - bc''d' + b''cd' - b'cd'' + b'c''d - b''c'd}$$

$$O = \frac{100 [B(c''d - cd'') + C(bd'' - b''d) + D(b''c - bc'')] }{bc'd'' - bc''d' + b''cd' - b'cd'' + b'c''d - b''c'd}$$

$$G = \frac{100 \begin{vmatrix} b & b' & B \\ c & c' & C \\ d & d' & D \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} b & b' & b'' \\ c & c' & c'' \\ d & d' & d'' \end{vmatrix}} = \frac{100 [B(cd' - c'd) - C(bd' - b'd) + D(bc' - b'c)] }{bc'd'' - bc''d' + b''cd' - b'cd'' + b'c''d - b''c'd}$$

Таким образом, Брио пользуется методом детерминантов³. Мы видим, что знаменатели во всех наших трёх случаях одинаковы. Процентное содержание Q части IV находится из равенства $F + O + G + Q = 100$. Если трёх элементов, которые не входят в часть IV, подобрать нельзя, то выбираем 4 элемента k, l, m, n, входящие, вообще говоря, во все 4 части I, II, III, IV. Пусть процентное содержание их в A, а также I – IV таково

k	{	в содержится $\begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}$	A	I	II	III	IV
			B	b	b'	b''	b'''
l	{	в содержится $\begin{smallmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{smallmatrix}$	A	I	II	III	IV
			C	c	c'	c''	c'''
m	{	в содержится $\begin{smallmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{smallmatrix}$	A	I	II	III	IV
			D	d	d'	d''	d'''
n	{	в содержится $\begin{smallmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{smallmatrix}$	A	I	II	III	IV
			E	e	e'	e''	e'''

Тогда подсчитывая содержание каждого элемента в 100 частях A, в F, O, G, Q частях частей I, II, III, IV, получим уравнения

³ Сравни P. Gordon und W. Alexejeff. Übereinstimmung der Formeln der Chemie und Invariantentheorie, Sitz. D. phys. Med. Soc. zu Erlangen, 1900, 38 pp.

$$bF + b'O + b''G + b'''Q = 100B$$

$$cF + c'O + c''G - c'''Q = 100C$$

$$dF + d'O + d''G + d'''Q = 100D$$

$$eF + e'O + e''G + e'''Q = 100E$$

Из них находим процентные числа F, O, G, Q. Проверка $F + O + G + Q = 100$. Если взять биотитовый гранит, то здесь применим первый случай и данные там формулы. Мы разберём этот случай применительно к тому, что сделал А.С. Брио. Произведённые им химические анализы гранитов и составляющих их минералов сами по себе представляют интерес и потому даются ниже. Он изучал серые граниты, из которых три взяты с о. Потёмкина близ Екатеринослава и один из окрестностей с. Ст. Кайдаки, 7 вёрст от Екатеринослава. К сожалению микроскопическое исследование Брио не производил, хотя в то время в России уже были сделаны первые опыты в этом направлении (А.А. Иностранцев и Блюмфельд в 1867 г. и А.П. Карпинский в 1869 г.). В виду этого нельзя утверждать, что граниты эти не содержали хотя бы небольших количеств роговой обманки и других тёмных силикатов. По крайней мере в недавно (1918) вышедшей книге Н.И. Безбородько «Контактовые взаимоотношения гранитов и гнейсов в связи с изучением этих пород вдоль побережья Днепра (Новогеоргиевск – Никополь)» для о. Потёмкина и Ст. Кайдаков (стр. 29-93) для этих пород отмечается постоянное наличие роговой обманки и кроме того самая порода не считается им за типичный гранит, а сближается с гнейсами. Этот последний вопрос здесь мы оставим в стороне и во избежание путаницы будем называть эту породу гранитом, хотя по-видимому точка зрения Н.И. Безбородько и более правильна (однако и по нему это ортогнейс с ассимиляцией только другой породы).

Таб. 1. Tab. 1.

	Ортоклаз Orthoklas	Олигоклаз Oligoklas	Биотит Biotit
SiO ₂	67.87	63.34	39.34
Al ₂ O ₃	17.00	21.85	17.52
Fe ₂ O ₃ включая FeO	0.76	0.44	19.79
CaO	0.50	4.03	0.61
MgO	0.18	0.56	13.01
K ₂ O	11.56	2.81	6.26
Na ₂ O	1.63	6.16	2.18
H ₂ O	0.50	0.81	1.29
	100.00	100.00	100.00

Таб. 2. _Tab. 2.

	№1 Гранит – Granit	№2 Гранит – Granit	№3 Гранит – Granit	№4 Гранит – Granit
SiO ₂	76.05	72.70	71.07	75.69
Al ₂ O ₃	10.86	12.16	12.82	10.60
Fe ₂ O ₃ включая FeO	2.26	.73	4.64	2.29
CaO	0.97	1.13	0.86	1.46
MgO	1.51	2.02	2.22	1.58
K ₂ O	6.05	5.71	5.47	5.86
Na ₂ O	1.83	1.95	2.36	1.75
H ₂ O	0.47	0.60	0.56	0.77
	100.00	100.00	100.00	100.00

В таб. 1 и 2 приводятся цифры анализов не непосредственно полученные, а редуцированные и пересчитанные на сто, как это сделал сам Брио. В таб. 2 первые три анализа относятся к различным образцам серого гранита с о. Потёмкина, а четвёртый анализ характеризует гранит Ст. Кайдаков.

В таб. 3 дан вычисленный количественный минералогический состав всех четырёх гранитов. Вычисление делалось, как уже указывалось, по формулам, причём обращалось внимание на содержание в минералах и в гранитах глинозёма, окиси железа и окиси калия. Вычисление Брио я проверил только для содержания ортоклаза и олигоклаза в первом граните: я нашёл при этом близкие, но не вполне тождественные цифры, именно для ортоклаза 45.57 %, для олигоклаза 6.61 %.

Таб. 3. _Tab. 3.

Минералы	№1 Гранит – Granit	№2 Гранит – Granit	№3 Гранит – Granit	№4 Гранит – Granit
Кварц – Quarz	38.42	32.83	30.11	39.87
Ортоклаз – Orthoklas	45.51	36.93	31.42	43.81
Олигоклаз – Oligoklas	6.55	13.10	16.60	6.58
Биотит – Biotit	9.52	17.14	21.87	9.74
	100.00	100.00	100.00	100.00

Работавший ранее над анализами английских гранитов и их минералов S. Naughton шёл несколько сходным с Брио путём – он тоже составлял уравнения для отдельных минералов, но у него были другие приёмы, а результаты оказались мало удовлетворительными также потому, что в составе гранитов из полевых шпатов он отводил исключительное место ортоклазу, полагая, что плагиоклаз играет ничтожную роль или может даже совсем от-

существовать ⁴. Однако Брио, если и указал теоретически правильный путь решения задачи, то во всяком случае желательной точности при своих химических исследованиях всё же не достиг. Это видно из сделанного мною расчёта содержания во всех четырёх гранитах биотита по количеству магнезии. Я здесь получил достаточно отличные от даваемых им цифр: для первого 11.61 %, для второго 15.54 %, для третьего 17.06 % и для четвёртого 12.14 %. Можно, конечно, искать причину разницы в наличии в гранитах некоторого количества роговой обманки. Однако, едва ли в этом может быть главная причина: среднее содержание магнезии в роговых обманках нормальных роговообманковых и биотитовороговообманковых гранитов (моё среднее из 9) достаточно близко к содержанию её в биотите, анализированном Брио: 14.18 %. Правда, колебания могут быть достаточно большими: от 10.39 до 17.58 %.

Заслуга Брио, однако, не ограничивается только предложенным им методом: в этой же работе он подходит к общей характеристике гранитов с химической стороны, указывая, что этот же путь даёт возможность характеризовать и другие изверженные породы. Для сравнения с изученными им самим гранитами он делает аналогичные расчёты ещё для 39 гранитов из месторождений Зап. Европы. Он при этом констатирует тот важный факт, что несмотря на значительные колебания в количественном минералогическом и химическом составе этих пород наблюдаются некоторые параметры породы очень устойчивые, что видно, напр., из следующих цифр, характеризующих исследованные им граниты (таб. 4).

Таб. 4. _ Tab. 4.

Минералы	№1 Гранит – Granit	№2 Гранит – Granit	№3 Гранит – Granit	№4 Гранит – Granit
Общее количество кислорода в граните	48.70	48.17	47.94	48.50
Общее количество кислорода в полуторных окислах R_2O_3	5.75	6.79	7.36	5.63
Общее количество кислорода в одноатомных и двуатомных окислах $R'_2O + R''O$ ¹⁾	2.39	2.60	2.67	2.50
Количество кислорода, связанного с кремнием	40.56	38.78	37.90	40.37

А. Брио далее выводит шесть коэффициентов, обозначаемых им буквами от *a* до *f* включительно, которые по его мнению должны характеризовать каждую изверженную горную породу. Из них два коэффициента отвечают тому, что позже у Rosenbusch'a получило название Metallatomzahl (коэффициент *d* у Брио) и Atomzahl (*e* Брио) ⁵.

⁴ Samuel Haughton. Quart. Journ. of the Geol. Soc. of London. 1856, Vol. XII, p. 171-202; 1862, Vol. XVIII; J. Roth. Die Gesteinsanalysen in tabellarischen Übersicht und mit krit. Erläuterungen. Berlin, 1861; моя книга о количественном составе гранитов (цитировано выше), стр. 17-24. У меня подробно описаны приёмы расчёта, практиковавшиеся Haughton'ом, о них же говорит J. Roth.

⁵ H. Rosenbusch. Tschermak's Miner. u. Petrograph. Mitteilungen. 1890, Bd. XI, p. 144.

К НОВОЙ ПАРАДИГМЕ ПЕТРОГРАФИИ

Войтеховский Ю.Л.

Геологический институт Кольского НЦ РАН, г. Апатиты

В статье коротко рассмотрены основные моменты дискуссии, организованной проф. В.М. Изойтко в Институте «Механобр» и изложенной в журнале «Обогащение руд» несколько лет назад. Точка зрения автора состоит в том, что современная петрография нуждается в новом теоретическом представлении о пространстве горной породы (руды). Оно может быть построено средствами математической статистики на основе фундаментальных концепций топологического, метрического, толерантного и частично упорядоченного пространств.

Введение

Изредка жизнь дарит нам встречи с людьми выдающимися, но мы осознаём это слишком поздно. Остается вспоминать давние события, пытаюсь извлечь уроки. Хочу вспомнить эпизод из многолетнего общения с проф. В.М. Изойтко. Пройдя стажировку в Центре геостатистики при Высшей национальной горной школе Парижа в рамках обучения в докторантуре при Институте геологии Коми НЦ УрО РАН, я был полон идеей о применении статистических методов к описанию структур горных пород и руд. Одна за другой появлялись статьи, отсылаемые в «Обогащение руд», где и попадали на рецензию к В.М. Редколлегии журналов не любят статей с заранее объявленными продолжениями. Но тут чудесным образом серия получилась [1-10], хотя каждую статью приходилось отстаивать в переписке. В итоге редколлегией была объявлена [6] и в феврале 1998 г. на техническом совете АО «Механобр Инжиниринг» состоялась [9] публичная дискуссия. Напомню её основные тезисы, не потерявшие актуальности.

Тезис I. Петрографии нужна теоретическая концепция кристаллической горной породы (руды) как пространства.

Долгое время считалось, что Земля плоская, оказалось – сферическая. С современной точки зрения, эти две (не столько старая и новая, сколько локальная и глобальная) истины согласуются в известном топологическом утверждении, что сфера локально евклидова. Воспользовавшись этой отдалённой аналогией, поясню первый тезис так. Петрографы (и вообще все геологи) считают, что кристаллические горные породы суть большие агрегаты минеральных индивидов (зёрен, кристаллов), в чём всякий может убедиться невооружённым глазом или с помощью микроскопа. Полагаю, что эта истина локальна. Но в чём тогда глобальная истина?

Прежде чем дать ответ на этот вопрос, сделаю одно замечание. Как представляется, отсутствие теории кристаллической горной породы (руды)

гносеологически связано с неуверенностью минералогов в возможностях абстрагирования. Именно поэтому в данной области все теории являются эмпирическими обобщениями. В качестве образца решительного абстрагирования напомним определение гранулометрии по Ж. Матерону. «Пусть E – некоторое множество и $\mathfrak{S} \subset \mathfrak{R}(E)$. Гранулометрией на $\mathfrak{S}$ называется всякое однопараметрическое семейство ψ_λ , где $\lambda \geq 0$, отображений класса $\mathfrak{S}$ в себя, удовлетворяющее следующим условиям: (1) $\psi_\lambda(A) \subset A$ для любых $\lambda \geq 0$ и $A \in \mathfrak{S}$; (2) $A, B \in \mathfrak{S}, A \subset B \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\lambda(B)$ для любых $\lambda \geq 0$; (3) $\lambda \geq \mu \geq 0 \Rightarrow \psi_\lambda(A) \subset \psi_\mu(A)$ для любых $A \in \mathfrak{S}$; (4) $\psi_\lambda \times \psi_\mu = \psi_\mu \times \psi_\lambda = \psi_{\sup(\lambda, \mu)}$ для любых $\lambda, \mu \geq 0$ » [6].

На первый взгляд – ничего общего с привычным гранулометрическим анализом. Но если принять, что E – просеиваемый материал, $\mathfrak{S}$ – совокупность навесок из их мыслимого разнообразия $\mathfrak{R}(E)$, $\psi_\lambda(A)$ – остаток на сите с размером ячеек λ после просеивания навески A , знак $\times$ показывает последовательное просеивание в различных ситах, то всё встаёт на свои места. Легко видеть, что $(\psi_\lambda \times \psi_\mu) \times \psi_\varphi = \psi_\lambda \times (\psi_\mu \times \psi_\varphi) = \psi_{\sup(\lambda, \mu, \varphi)}$ и $\psi_\lambda \times \psi_\lambda = \psi_\lambda$. То есть, мыслимые для данной навески ситования образуют ассоциативный и коммутативный группоид (не являющийся даже полугруппой), в котором каждый элемент идемпотентен. Рутинная процедура ситования привела нас к основаниям современной алгебры! Но зачем? А затем, что подобные определения лежат в основании математической морфологии, применяемой в автоматических анализаторах структур металлов и сплавов. Согласитесь, полезная вещь...

Можно ли предложить нечто похожее для кристаллической горной породы? Моя давняя идея состоит в том, чтобы понять её как пространство с набором фундаментальных свойств, следующих из неотъемлемых межэлементных отношений. Первый шаг на этом пути – определение горной породы как топологического пространства [7]. Класс объектов $\mathfrak{R}$ называется топологическим пространством, если он может быть представлен как объединение некоторого семейства $\mathfrak{S}$ своих подмножеств, замкнутого относительно объединения любого числа и пересечения любых двух из них. Семейство $\mathfrak{S}$ (включая пустое множество) называется топологией $\mathfrak{R}$. Если существует такое семейство $\mathfrak{N}$ множеств, что каждое множество из $\mathfrak{S}$ есть объединение некоторых множеств из $\mathfrak{N}$, то последнее называется базой $\mathfrak{R}$.

На первый взгляд – сложно. Но заметим, что всякое множество допускает две предельные топологии: (1) тривиальную – $\mathfrak{S}$ состоит из пустого множества и самого $\mathfrak{R}$, (2) дискретную – $\mathfrak{S}$ содержит любое подмножество $\mathfrak{R}$. Применительно к кристаллической горной породе это означает, что $\mathfrak{S}$ представляет собой (1) монолит, не разделяемый на составные части, (2) множество всех ассоциаций (не обязательно связных) слагающих горную породу минеральных зёрен, в совокупности образующих базу $\mathfrak{N}$. Дискретная топология предоставляет максимум возможностей для дальнейшего теоретизирования. Но, возможно, проблема состоит в том, чтобы между указанными

крайностями найти ту топологию, которая и составляет специфику кристаллической породы как объекта определённого уровня в иерархии неорганической природы.

Следующим шагом является определение горной породы как метрического пространства. Множество $\mathfrak{R}$ называется метрическим пространством, если для его любых элементов i и j определена функция ρ_{ij} , называемая метрикой (расстоянием) и обладающая свойствами: (1) $\rho_{ij} \geq 0$, причём $\rho_{ij} = 0$ равносильно $i \equiv j$, (2) $\rho_{ij} = \rho_{ji}$, (3) для любых трёх элементов i, j, k выполнено $\rho_{ij} + \rho_{ik} \geq \rho_{jk}$. Это определение кажется простым, поскольку напоминает школьный пример евклидовой метрики. Но на множестве минеральных зёрен (в базе топологии) или их произвольных ассоциаций (в самой топологии) в кристаллической горной породе можно определить много других метрик.

К ещё одному определению горной породы как пространства ведёт рассмотрение фундаментальных отношений между её элементами – минеральными зёрнами. Таких отношений два, но каждое допускает логическое отрицание: (1) видовая (не) тождественность, (2) (не) контактирование¹. Анализ показывает, что наиболее интересным для развития теории является отношение неконтактирования, которое рефлексивно, симметрично и не транзитивно, т.е. является толерантностью, превращая горную породу в пространство толерантности.

Видимо, это максимум того, что можно определить для всякой кристаллической горной породы (руды). Это топологическое (с различными топологиями от тривиальной до дискретной) и метрическое (с различными метриками для минеральных зёрен и их произвольных ассоциаций) пространство, а ещё пространство толерантности с образующим отношением пространственного неконтактирования минеральных зёрен. Заметим, что к пространству толерантности ведёт и отношение непустого пересечения ассоциаций минеральных зёрен.

Тезис II. Концепция кристаллической горной породы (руды) может быть построена на фундаменте математической статистики.

Предыдущие определения показывают принципиальную возможность применения фундаментальных математических концепций в петрографии. Но нельзя ли обойтись без них, полагаясь на интуицию? Так, в минералогии и петрографии многие годы обсуждается идея трансляционного порядка. По-видимому, в её основании лежит психологический феномен – очарование строгой теории, привнесённой из кристаллографии. Физические методы не обнаружили периодического строения горной породы. И даже теоретически

¹ Ранее на этой стадии рассуждения я выделял и субстанциальную (не) тождественность. Но это отношение вместе с (не) контактированием легко выражается через метрику.

не определено, что следует понимать под элементарной ячейкой горной породы, кроме того лишь, что она должна представлять горную породу по составу и строению. Не употребляю здесь термин «структура», описательный в петрографии настолько, что не позволяет развить формальную теорию.

Не менее популярно представление о «структуре Коксетера» (мыльной пены) как равновесной конфигурации межзерновых границ горной породы (руды). Условия равновесия структуры Коксетера: общий минимум площади межзерновых границ и равенство углов на контактах зёрен – в целом соответствуют физическим представлениям о равновесии мономинеральной горной породы, которое теоретически достижимо путём диффузии атомов через межзерновые границы. Но оно недостижимо для полиминеральной породы. Кроме того, структура Коксетера не является периодической, а равновесная форма минерального зерна рассчитана в статистическом приближении и имеет дробное число вершин, рёбер и граней.

Бытующие представления об идеальном устройстве горной породы (руды) противоречивы. Но в них присутствует рациональное зерно – статистический подтекст, будь то рассуждение об элементарной ячейке или структуре Коксетера. Моя идея состоит в том, чтобы не апеллировать к идеалу горной породы, а разработать статистический метод анализа коррелятивности её составных частей – минеральных зёрен или их ассоциаций. В той или иной аналитической форме здесь задействуются ранее изложенные представления о топологиях и метриках горной породы. Наиболее перспективной для применения представляется хорошо разработанная теория кригинга [4, 8, 10].

В её основе лежит представление об изучаемом феномене как пространственно распределённой случайной функции. Феномен представляется как одна из бесконечного числа возможных реализаций. Его однородность позволяет принять гипотезу стационарности и применить простейший вариант теории. Применительно к организации горной породы ковариационный анализ позволяет рассчитать ковариограмму, характеризующую пространственную коррелируемость минеральных зёрен или их ассоциаций различных видов в зависимости от расстояния между ними. На её основе процедура кригинга позволяет оценить вероятность принадлежности данного зерна (ассоциации) к тому или иному виду по аналогичной информации об окружающих зёрнах (ассоциациях).

Изучение норитов и габброноритов Фёдорово-Панских тундр показало, что они являются частично упорядоченными. Минеральные зёрна различных видов коррелированы в них на расстоянии не более двух координационных сфер. По-видимому, все магматические горные породы являются частично (и слабо) упорядоченными. Причина этого обсуждалась А.Б. Вистелиусом в его модели идеального гранита. А именно, кристаллизация данного минерального зерна исключает зарождение зерна того же сорта в кристаллизационном дворике и повышает вероятность нахождения зерна другого сорта

в непосредственном контакте в сформировавшейся горной породе. Скорее всего, существуют и неупорядоченные горные породы, реализующие модель «чистой мозаики».

Цель всякой структурной теории, среди прочего – возможность предсказания положения каждого элемента в пространстве. В этом смысле специфика горной породы состоит в том, что принадлежность каждого элемента (минерального зерна или их ассоциации) к данному виду предсказуемо с некоторой вероятностью. Предельно упорядоченную (в стиле идеального кристалла) горную породу представить можно, но этот идеал не имеет с реальными горными породами ничего общего. Гораздо ближе к ним модель «чистой мозаики». Современное описание идеального кристалла (в духе r, R -систем Делоне) строится от локального порядка – к глобальному. Степень упорядоченности горной породы в силу специфики статистического описания фиксируется пространственной ковариограммой, определяемой из всей совокупности межэлементных отношений.

Тезис III. Несмотря на непрерывное изменение модального состава горных пород, их структурная классификация возможна.

Ещё одна важная задача структурной теории горной породы – построение исчерпывающей классификации. В основе существующих классификаций лежат непрерывно изменяющиеся химический и модальный составы пород при резком подчинении их структурных признаков. Это привело к конвенциональному выбору разделительных границ и одновременно породило пессимизм в отношении возможности построения естественной петрографической классификации. Но с формальной точки зрения задача вполне разрешима – непрерывность параметров не противоречит дискретности функции. Вопрос в том, какие параметры и функцию целесообразно выбрать для описания организации горной породы. Вариант, согласованный с изложенными принципами, дан в [1, 3, 5]. Он сводится к тому, чтобы в основу описания горной породы положить не модальный и химический составы горной породы, а отношения между слагающими её элементами, в простейшем случае – вероятности (частоты) контактов минеральных зёрен различных видов. Тип петрографической структуры выражается топологическим типом «структурной индикатрисы» – соответствующей поверхности 2- ... 4-го порядков в n -мерном пространстве, где n – число минералов в горной породе.

Дело будущего – развитие теории структурных перестроек горной породы в различных геологических процессах. Её изложение возможно на языке алгебры матриц. А именно, организация горной породы в терминах вероятностей различных межзерновых контактов легко записывается в виде симметрических матриц. Преобразование горной породы с сохранением структурного типа есть невырожденное преобразование подобия соответствующей матрицы, хорошо известное в линейной алгебре. Совокупность таких преобразований образует группу подобно тому, как образуют точеч-

ную группу движения кристаллического полиэдра или пространственную группу – движения кристаллической решётки. В рамках алгебры матриц возможно описание и качественных (структурных) перестроек горной породы, в том числе с исчезновением или новообразованием минералов. Теория организации и перестроек горной породы должна стать подспорьем физико-химической теории её твердофазных превращений.

Заключение

Считаю развиваемый взгляд на организацию горной породы последовательным и допускающим дальнейшее развитие. Все математические формализмы сводимы к алгоритмам, допускающим автоматическую (приборную) реализацию. Именно такой критерий оценки всякой теории неоднократно высказывала В.М. Изойтко в дискуссиях с автором.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. Состояние и перспективы // Обогащение руд. 1995. № 6. С. 18-22.
2. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. II. Принцип априорных вероятностей // Обогащение руд. 1996. № 3. С. 30-33.
3. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. III. Некоторые проблемы систематики структур // Обогащение руд. 1997. № 1. С. 28-30.
4. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. IV. Индикаторные функции // Обогащение руд. 1997. № 3. С. 32-36.
5. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. V. К аналитической систематике структур // Обогащение руд. 1997. № 4. С. 31-33.
6. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VI. Рассуждение о методе: от конкретного к абстрактному – и обратно // Обогащение руд. 1997. № 6. С. 27-31.
7. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VII. Метрики и топологии // Обогащение руд. 1998. № 1. С. 23-26.
8. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. VIII. Простой и обычный крайгинг // Обогащение руд. 1998. № 2. С. 32-37.
9. Дискуссия по проблеме «Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах» // Обогащение руд. 1998. № 3. С. 25-29.
10. Войтеховский Ю.Л. Статистический анализ минеральных сростаний в породах и рудах. IX. Дискретный крайгинг, эрмитовы полиномы и гауссов анаморфозис // Обогащение руд. 1999. № 1-2. С. 46-48.

МОДЕЛИРОВАНИЕ P – T – t ТРЕНДОВ СТАВРОЛИТСОДЕРЖАЩИХ ПОРОД СЕВЕРНОГО ПРИЛАДОЖЬЯ НА БАЗЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Гульбин Ю.Л.

Национальный минерально-сырьевой университет «Горный»,
Санкт-Петербург, gulbin@spmi.ru

Рассмотрены результаты численных экспериментов по моделированию P – T – t траекторий среднетемпературных метapelитов Сев. Приладожья с помощью программы GEOTHERM [10], описывающей тепловую эволюцию земной коры в зонах коллизии и аккреции. Специальное внимание уделено ограничениям на физические величины, участвующие в расчётах.

Тектоно-термальные модели

К числу важнейших задач метаморфической петрологии относится изучение термобарической эволюции метаморфических комплексов. Для её решения используются различные методы и подходы: парагенетический анализ, минеральная термобарометрия, метод P – T псевдосечений. Во всех случаях на основе исследования вещественного состава горных пород и минералов выявляются пространственно-временные закономерности изменения условий минеральных равновесий и строится P – T – t траектория метаморфизма.

Наряду с реконструкцией P – T – t трендов по петрохимическим и минералого-геохимическим данным, актуальна задача прямого моделирования траекторий точек геологического пространства в координатах P – T – t , основанного на анализе термальной структуры земной коры в пределах складчатых поясов. Она решается с помощью тектоно-термальных моделей, описывающих тепловую эволюцию аккреционных и коллизионных орогенов на базе уравнения теплопроводности [13, 19 и др.].

С позиций рассматриваемых моделей факторами тепловой эволюции орогенов выступают: быстрое утолщение земной коры посредством надвигов и относительно медленная релаксация, синхронная с подъёмом толщ к поверхности под действием эрозии. Главные источники тепла – радиоактивный распад и тепловые потоки, формирующиеся на границе коры и верхней мантии. Механизмы теплопереноса – теплопроводность и конвекция, причём доминирует первая. В этом случае распространение тепла вдоль вертикали z в заданной области земной коры и времени описывается дифференциальным уравнением [19]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - v_z \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{A}{\rho C}$$

где T – температура, t – время, κ – коэффициент температуропроводности ($\kappa = k / \rho C$, где k – коэффициент теплопроводности), v – скорость течения среды (флюидных потоков, магм, скорость перемещения тектонических блоков в ходе субдукции и апплифта и т.д.), A – количество тепла, выделяемое в единице объёма за единицу времени (мощность тепловых источников в земной коре), C – удельная теплоемкость, ρ – плотность пород земной коры. Уравнение решается численными методами при заданных начальных и граничных условиях, а также исходной «геометрии» утолщенной коры и её эволюции во времени. Решением служит выражение, описывающее изменение температуры с глубиной как функцию t .

Начальные условия. Стабильная континентальная кора характеризуется стационарной геотермой, вид которой во многом зависит от распределения радиоактивных элементов (U , Th , ^{40}K) и мощности источников радиогенного тепла N в верхних и нижних слоях литосферы. В зависимости от выбранной модели земной коры, наклон геотермы (геотермический градиент) будет меняться. При типичных для фанерозойской континентальной коры значениях мантийного теплового потока $q_M = 30$ мВт/м², теплового потока на поверхности Земли $q_s = 60$ мВт/м², коэффициента теплопроводности $k = 2.25$ Вт/м×К и величине N , которая уменьшается от 3 мкВт/м³ до 0 в пределах верхнего 20-ти километрового слоя («стандартная» модель), средний геотермический градиент составит 16 град/км, температура в основании коры (на глубине 35 км) – 555 °С. При тех же параметрах и величине N , которая остается постоянной до глубины 35 км и равной 1.5 мкВт/м³ (модель «горячей» коры), средний геотермический градиент составит 25 град/км, температура у поверхности Мохо – 875 °С [19].

Идеализированные представления о формировании утолщённой коры сводятся к следующему. Утолщённая кора рассматривается как результат: (1) «мгновенного» надвига одного фрагмента исходной коры на другой, либо (2) горизонтального сжатия коры в ходе коллизии, что приводит к удвоению её мощности. В первом случае, если за основу взята «стандартная» геотерма, результирующая геотерма приобретает пилообразную форму, во втором случае – растягивается вдоль оси z [13].

Граничные условия. Температура на поверхности T_s считается постоянной и равной 0 °С. Температура в основании земной коры T_M изменяется во времени, но при этом, как правило, считается постоянной величина q_M .

Эволюция утолщенной коры после коллизии сводится к апплифту. При этом обсуждается несколько возможных сценариев [13]. Один предполагает, что апплифт начинается сразу после удвоения мощности коры под действием эрозии. Другой предусматривает временную задержку апплифта (порядка 20 Ма). Геологическое основание для задержки – конечная скорость коллизии, приводящая к тому, что длительность коллизионной стадии может достигать десятков миллионов лет.

При любом сценарии эволюция утолщённой коры сопровождается термальной релаксацией (нагревом) и эрозией (декомпрессией), с какого-то момента протекающих одновременно. Вследствие этого литостатическое давление, которое испытывают горные породы при достижении пика термального метаморфизма, заметно меньше того максимального давления, которое достигается на ранних стадиях [12]. Если скорость эрозии мала, нисходящая ветвь траектории, которую описывает горная порода в пространстве $P - T$ параметров, проходит вблизи стационарной геотермы [13].

С момента появления тектоно-термальные модели с успехом использовались для описания $P - T - t$ эволюции и оценки параметров, контролирующих процессы регионального метаморфизма, в различных геодинамических обстановках [11, 19]. Было показано, что достижение $P - T$ условий формирования метаморфических комплексов малых глубин (андалузит-силлиманитовой фациальной серии) требует экстремально высокой мощности тепловых источников в земной коре, значительной интенсивности мантийного теплового потока, либо крайне низких значений коэффициента теплопроводности. Вследствие плавления нижних слоев земной коры и перемещения расплавов на верхние горизонты важную роль наряду с кондуктивным механизмом теплопереноса в этом случае играет магматическая конвекция.

Программа GEOTHERM

Последнее обстоятельство учтено в ходе моделирования $P - T - t$ трендов ставролитсодержащих пород Сев. Приладожья на базе уравнения (1). С этой целью использована компьютерная программа GEOTHERM, разработанная в университете Сассари, Сардиния, Италия [10] и представляющая собой реализацию решения (1), основанного на методе конечных разностей, в среде MATLAB. Входными данными для расчётов служили начальные характеристики верхнего (осадочного), промежуточного (гранито-гнейсового) и нижнего (гранулитового) слоёв земной коры (их мощность, средние значения коэффициента теплопроводности, теплогенерирующей способности, удельной теплоёмкости и плотности), а также свойства литосферной мантии и кинетические параметры геотектонических процессов (длительности фаз коллизии и аплифта). По ним строился исходный температурный профиль (геотерма) как результат стационарного решения (1) в каждом узле заданного 1D геологического пространства. Дальнейшая эволюция геотермы анализировалась при соблюдении двух условий: 1) верхняя граница системы совпадает с дневной поверхностью, температура которой не меняется ($T_s = 0^\circ\text{C}$), 2) нижняя граница системы помещена на глубину 1650 км, где также поддерживается постоянная температура ($T_m = 2323\text{ K}$). Для учета конвективных явлений в рассмотрение вводились процессы частичного плавления пород гранулитового слоя. Предполагалось, что оно начинается при температуре, превышающей температуру гранитового солидуса, доля расплава ϕ линейно

возрастает с ростом T , а его перемещение на верхние горизонты происходит при условии $\phi > 0.06$. Предельная доля перемещаемого расплава составляет $\phi_{\max} = 0.35$. Интенсивное плавление способствует увеличению мощности гранито-гнейсового слоя за счёт сокращения мощности гранулитового слоя.

Численные эксперименты

С помощью GEOTHERM выполнена серия численных экспериментов, позволивших соотнести результаты прямого моделирования $P - T - t$ траекторий метapelитов Сев. Приладожья с данными геотермобарометрии [4]. Ниже рассматриваются результаты экспериментов; специальное внимание уделено ограничениям, накладываемым на физические величины, участвующие в расчётах.

Тепло радиоактивного распада. Мощность источников радиогенного тепла в земной коре (мкВт/м^3) есть функция концентрации радиоактивных изотопов и уменьшается со временем. Зависимость выражается формулой [14]:

$$H(t) = \rho[3.48 \cdot 10^{-6} \cdot C_K e^{0.554t} + 0.0256 \cdot C_{Th} e^{0.0495t} + C_U (0.9929 \cdot 0.0918 \cdot e^{0.1551t} + 0.0071 \cdot 0.576 \cdot e^{0.98485t})] \quad 2$$

где $\tilde{N}_U$, $\tilde{N}_{Th}$, $\tilde{N}_K$ – концентрации U, Th и K в ppm, t – абсолютный возраст в Ga. Предполагается, что верхняя континентальная кора обогащена радиоактивными элементами относительно нижней, но точное распределение концентраций в разрезе неизвестно. Поэтому среди моделей, описывающих изменение величины H с глубиной, наиболее часто используется экспоненциальная:

$$H(z) = H_0 \exp(-z/D) \quad 3$$

где H_0 – средняя скорость тепловыделения, связанного с радиоактивным распадом, вблизи земной поверхности, D – характеристическое расстояние. Современные значения H_0 в пределах стабильных (раннедокембрийских) блоков земной коры, оцененные на базе геотермометрических исследований [16], колеблются в узких пределах 0.4–1.1 мкВт/м^3 (Канадский щит). Реже они поднимаются до уровня 2.3 мкВт/м^3 (провинция Слейв), что сближает их со значениями, характерными для палеозойских орогенов, 2.6 мкВт/м^3 (Аппалачи). Те же значения, рассчитанные с помощью формулы (2) по данным о среднем составе архейских провинций, заключены в интервале 0.3–1.8 мкВт/м^3 (Африканская платформа) и близки расчётным значениям средней теплогенерирующей способности пород верхней континентальной коры, которые изменяются от 0.9 до 1.6 мкВт/м^3 в зависимости от выбранной модели. Аналогичные значения для нижней коры составляют 0.3–0.8 мкВт/м^3 [14]. Значительно более высокой интенсивностью выделения радиогенного тепла характеризуются породы некоторых протерозойских орогенов: Намакваленд, Намибия – 3.7 мкВт/м^3 [6], Уопмэй, Канада – 3.2–4.8 мкВт/м^3 [15],

Аделаида, Ю. Австралия – до 6 мВт/м^3 [17]. Будучи пересчитаны на возраст 1.9–2.6 Ga, они увеличиваются в 1.5–2 раза.

Тепловые потоки. В пределах большинства архейских кратонов наблюдаемый тепловой поток не превышает 60 мВт/м^2 . В протерозойских орогенах он поднимается до 90 мВт/м^2 . Ему соответствует (рассчитанный на основе данных о предполагаемой температуре литосферной мантии) тепловой поток через границу Мохо $11\text{--}25 \text{ мВт/м}^2$ [16]. Допускается, что в связи с глубинными термальными аномалиями, вызванными подъёмом мантийных плюмов или расколом континентальных плит, значения q_M могут возрасти до $30\text{--}40 \text{ мВт/м}^2$ [14].

Скорость апплифта. По данным геотермобарометрических и изотопно-геохронологических исследований, для метаморфических комплексов умеренных глубин характерная скорость поднятия тектонических блоков на позднеорогенной стадии составляет $0.6\text{--}2.7 \text{ мм/год}$ при минимальной продолжительности апплифта $10\text{--}11 \text{ Ма}$ [20–22]. Подобные оценки типичны, если принять во внимание, что преобладающая скорость эксгумации пород, составляющих верхнюю и среднюю утолщённую кору, под воздействием эрозии равна $1\text{--}10 \text{ мм/год}$ [8]. Согласуются они и с результатами изучения абсолютного

возраста и зональности метаморфических минералов, подтверждающими возможность быстрой ($\leq 12\text{--}15 \text{ Ма}$) коллизии и быстрого ($\leq 7.5 \text{ Ма}$) апплифта в ходе орогенеза [9].

Во всех экспериментах за основу бралась трёхслойная модель континентальной коры мощностью 35 км (табл. 1). При построении Р–Т–t траекторий учитывались результаты физико-химического моделирования минерального состава ставролитсодержащих пород Сев. Приладожья. На Р–Т псевдосечении для эталонного образца Н 4/1 в системе MnNCKFMASH область наиболее ранних зародышей граната имеет координаты 520°C , $7.0\text{--}7.2 \text{ кбар}$, в процессе их роста температура увеличивалась до $570\text{--}600^\circ\text{C}$, а давление уменьшалось до $3.5\text{--}4 \text{ кбар}$. Продолжительность порфиروبластеза составляла примерно 4 Ма [3].

В 1-й серии экспериментов изменение значений N с глубиной описывается ступенчатой функцией

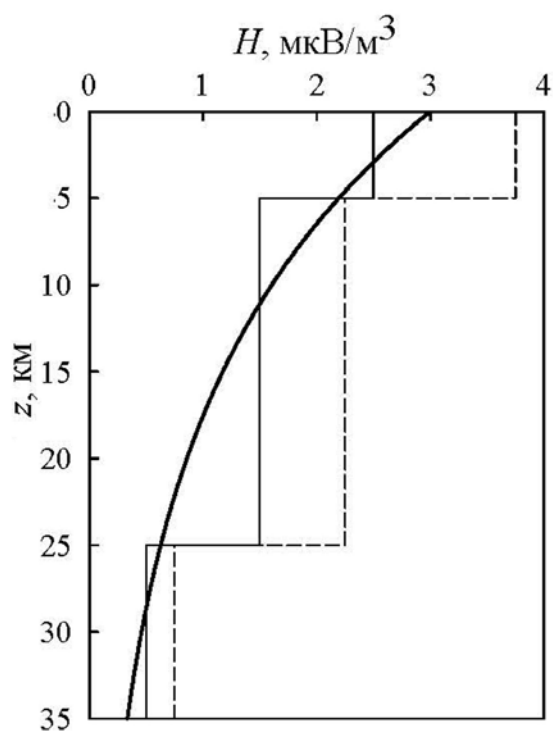


Рис. 1. Модельные зависимости средней скорости выделения радиогенного тепла H от глубины z . Кривой линией показана зависимость $H(z) = H_0 \exp(-z/D)$, $H_0 = 3 \text{ мВт/м}^3$, $D = 16 \text{ км}$, ступенчатыми линиями – зависимости, использованные в 1-й (сплошная), 2-й и 3-й (пунктир) сериях экспериментов.

(2.5 мкВт/м³ для осадочного слоя мощностью 5 км, 1.5 мкВт/м³ для верхней коры мощностью 20 км, 0.5 мкВт/м³ для нижней коры мощностью 10 км), аппроксимирующей зависимость (3) с параметрами: $H_0 = 3$ мкВт/м³, $D = 16$ км (рис. 1).

Таблица 1. Численные значения параметров, использованных для моделирования Р–Т–t траекторий.

Номер	Слой	Мощность, км	ρ , кг/м ³	C , Дж/кг·К
1	Осадочный	5	2500	890
2	Гранито-гнейсовый	20	2700	950
3	Гранулитовый	10	2900	1100

Продолжение таблицы 1.

Номер	Слой	k , Вт/м·К	H , мкВт/м ³	
			1-я серия	2-я и 3-я серии
1	Осадочный	2.5	2.5	3.75
2	Гранито-гнейсовый	2.7	1.5	2.25
3	Гранулитовый	2.3	0.5	0.75

Таблица 2. Средние содержания К, U, Th в породах гранито-гнейсовых куполов Сев. Приладожья и мощность источников радиогенного тепла.

Породы (число анализов)	К, мас. %	К, ppm	U, ppm	Th, ppm	H , мкВ/м ³
Питкярантская группа					
Плагингнейсы (5)	1.1	11000	3.6	12	
Микроклин-плагингкласовые гранито-гнейсы (34)	3.4	34000	3.2	14	
Плагингклас-микроклинговые гнейсо-граниты (14)	4.6	46000	3.5	24	
Все (53)	3.5	35000	3.3	16.5	2.3
Сортавальская группа					
Плагинггнейсы (6)	1.6	16000	1.5	4	
Микроклин-плагингкласовые гранито-гнейсы (24)	3.56	35600	1.6	6	
Все (30)	3.2	32000	1.6	5.6	1.1
Верхняя континентальная кора	2.23	22300	2.5	9.1	1.5

Примечание. В таблице использованы данные из работ [1, 2]. Значения H рассчитаны по формуле (2) при $t = 0$.

Сравнение с опубликованными данными показывает, что постулированная термальная структура не противоречит термальным моделям коры сопредельных областей Балтийского щита, приводимым в литературе [7, 18], и в целом согласуется с данными о химическом составе архейских и протерозойских толщ региона [1, 5 и др.] (табл. 2). В ходе каждого эксперимента мощность коры сначала «мгновенно» увеличивалась до 60 км (растяжением по z), а затем постепенно уменьшалась до исходного значения. Скорость аплифта v_A оставалась постоянной. В различных экспериментах v_A варьировали от 0.3 до 1.5 мм/год.

По данным расчетов, по всех случаях сразу после коллизии значения величин q_M и q_S составляли 20 и 70 мВт/м². Геотерма в момент начала аплифта характеризовалась средним наклоном 12.3 град/км, благодаря чему температура в основании коры достигала 740 °С. Пересечение геотермой линий «влажных» гранитового солидуса и гранитового ликвидуса приводило к тому, что аплифт на всем своем протяжении сопровождался интенсивным плавлением нижней коры.

При $v_A = 0.3$ мм/год (продолжительности аплифта 75 Ма) T_M в момент завершения аплифта поднималась до 890 °С. Базальный тепловой поток в этот момент достигал 35 мВт/м², тепловой поток на земной поверхности – 80 мВт/м². Траектория точки, первоначально расположенной на глубине 26 км (при давлении 7 кбар), в ходе аплифта демонстрировала увеличение T от 520 до 680 °С с последующим ее уменьшением, причём температурный максимум имел место при давлении около 5 кбар. Участок траектории между отметками 7 и 4 кбар (26 и 15 км) точка проходила за 33 Ма. При $v_A = 0.7$ мм/год (продолжительности аплифта 35 Ма) T_M в момент завершения аплифта равнялась 820 °С. Температурный максимум на $P - T$ траектории составлял 580 °С, длительность подъема с глубины 26 до глубины 15 км (временной интервал роста граната) – 16 Ма.

При $v_A = 1.5$ мм/год (продолжительности аплифта 17 Ма) T_M в момент завершения аплифта не превышала 730 °С. Аплифт в интервале 26-15 км происходил почти в изотермических условиях, его длительность равнялась примерно 7 Ма.

Во 2-й серии экспериментов термальная структура земной коры была изменена путём увеличения значения теплогенерирующей способности H каждого слоя в 1.5 раза (табл. 1). В этом случае q_M и q_S равнялись 20 и 90 мВт/м² в начале аплифта и не более чем 35 и 105 мВт/м² в момент завершения. Исходная геотерма имела средний наклон 20 град/км до глубины 25 км и 3.4 град/км в интервале глубин 25–60 км, вследствие чего температура у поверхности Мохо равнялась 620 °С. В связи с высокой температурой породы нижней коры на всём протяжении аплифта подвергались интенсивному плавлению.

При $v_A = 0.8$ мм/год (продолжительности аплифта 32 Ма) T_M к моменту окончательной стабилизации коры равнялась 820 °С. Температурный макси-

мум на $P - T$ траектории равнялся $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ и достигался при давлении 4.5 кбар. Длительность апплифта в интервале 26-15 км составляла около 14 Ма.

При $v_A = 1.5$ мм/год (продолжительности апплифта 17 Ма) финальное значение T_M равнялось $730\text{ }^{\circ}\text{C}$. Температурный максимум на $P - T$ траектории уменьшался до $575\text{ }^{\circ}\text{C}$, длительность апплифта в интервале 26-15 км – до 7 Ма.

При $v_A = 2.1$ мм/год (продолжительности апплифта 14 Ма) завершающее значение T_M равнялось $690\text{ }^{\circ}\text{C}$. В ходе апплифта температура на восходящей ветви $P - T$ траектории менялась в пределах $520\text{--}550\text{ }^{\circ}\text{C}$, длительность апплифта в интервале 26-15 км равнялась 5 Ма.

В 3-й серии экспериментов при тех же значениях H исследовалось влияние на форму $P - T$ траекторий изменяющейся во времени скорости апплифта (рис. 3). Благодаря высоким температурам в основании коры ($620\text{--}780\text{ }^{\circ}\text{C}$), важную роль в ходе апплифта по-прежнему играли процессы частичного плавления.

При $v_A = 2.0$ мм/год в интервале 1-4 Ма и последующим замедлением скорости апплифта до 0.7 Ма/год температурный максимум на $P - T$ траектории составляет $610\text{ }^{\circ}\text{C}$ при давлении 4.2 кбар. За счет неравномерной скорости апплифта восходящая ветвь траектории получает характерный S-образный изгиб. Длительность апплифта в интервале глубин 26-15 км (продолжительность порфиروبластеза) равна 13 Ма.

При $v_A = 2.0$ мм/год в интервале 1-4 Ма и последующим замедлением скорости апплифта до 1.0 Ма/год температурный максимум на $P - T$ траектории уменьшается до $590\text{ }^{\circ}\text{C}$ при давлении около 4 кбар. Длительность апплифта в интервале глубин, соответствующих началу и концу порфиروبластеза, в этом случае равна 11 Ма.

При $v_A = 2.0$ мм/год в интервале 1-4 Ма и последующим замедлением скорости апплифта до 1.3 Ма/год температурный максимум на $P - T$ траектории уменьшается до $560\text{ }^{\circ}\text{C}$. Длительность апплифта в интервале глубин 26–15 км составляет около 10 Ма. Две последние траектории наиболее близки к $P - T - t$ тренду, построенному для образца Н 4/1 методом псевдосечений [4].

Полученные результаты ограничивают условия $P - T - t$ эволюции изученных пород Сев. Приладожья значениями H , предположительно, типичными для протерозойской утолщенной коры (не менее 3.75 мкВт/м^3 в случае осадочного слоя, не менее 2.5 мкВт/м^3 – гранито-гнейсового и не менее 0.75 мкВт/м^3 – гранулитового слоя), а также скоростью апплифта 1–2 и более мм/год. При фиксированных значениях H семейства траекторий демонстрируют сходное по глубине расположение температурных максимумов. С ростом теплогенерирующей способности пород верхней и нижней коры, а также уменьшением продолжительности восходящей ветви траектории до значений, сопоставимых с длительностью порфиروبластеза (~ 4 Ма), эти максимумы смещаются вверх, благодаря чему достигаются условия, близкие к пиковым условиям малоглубинного метаморфизма, характерного для ставролитсодержащих пород Сев. Приладожья.

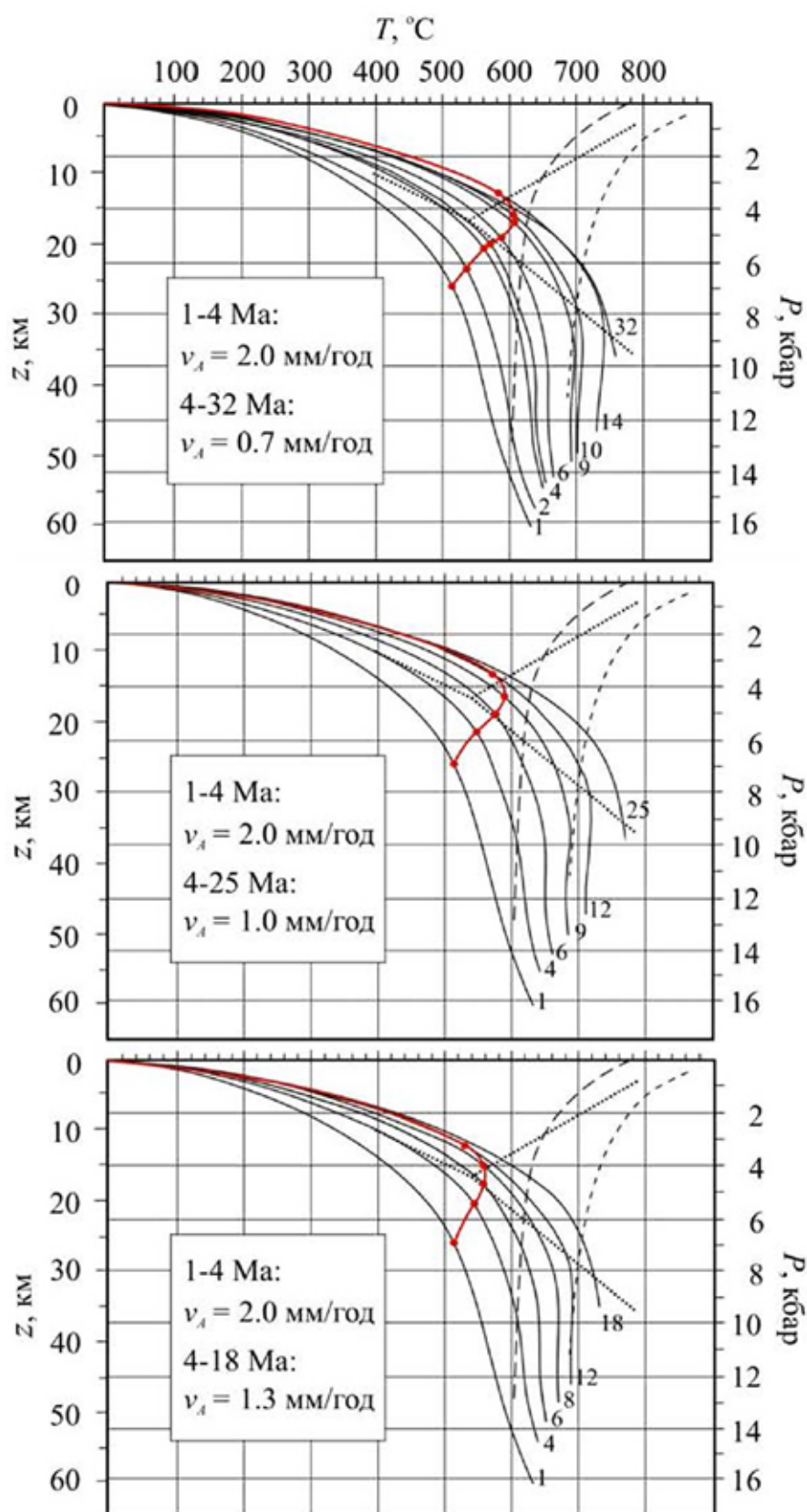


Рис. 2. Результаты моделирования $P - T - t$ траекторий (3-я серия экспериментов). Тонкие сплошные кривые – геотермы, числа рядом – время с начала апlifта (Ma). Красная кривая – $P - T$ траектория точки, первоначально расположенной на глубине 26 км (при давлении 7 кбар), в ходе апlifта. Точечный пунктир – линии равновесия полиморфов Al_2SiO_5 , штриховой и длинный штриховой пунктир – «влажные» гранитовый солидус и ликвидус.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности № 5.2115.2014/К на 2014-2016 гг.

Список литературы

1. Беляев А.М., Гавриленко В.В. Распределение олова и некоторых других редких элементов в породах гранитогнейсовых куполов Сев. Приладожья // Вестник ЛГУ. 1985. № 14. С. 77-81.
2. Григорьев Н.А. Распределение химических элементов в верхней части континентальной коры. Екатеринбург: УрО РАН, 2009. 382 с.
3. Гульбин Ю.Л. Композиционная зональность в гранате и реконструкция кинетики метаморфической кристаллизации // Зап. РМО. 2012. № 6. С. 1-17.
4. Гульбин Ю.Л. Р–Т тренды и моделирование эволюции минерального состава метапелитов Сев. Приладожья в системе MnNCKFMASH // Зап. РМО. 2014. № 6 (в печати).
5. Седова И.С., Глебовицкий В.А. Геохимия ранних мигматитов Сев. Приладожья // Зап. РМО. 2002. № 2. С. 1-16.
6. Andreoli M.A.G., Hart R.J., Ashwal L.D. et al. Correlations between U, Th content and metamorphic grade in the western Namaqualand Belt, S. Africa, with implications for radioactive heating of the crust // J. Petrol. 2006. V. 47. P. 1095-1118.
7. Balling N. Heat flow and thermal structure of the lithosphere across the Baltic Shield and northern Tornquist Zone // Tectonophysics. 1995. V. 244. P. 13-50.
8. Burbank D.W. Rates of erosion and their implications for exhumation // Miner. Mag. 2002. V. 66. P. 25-52.
9. Caddick M.J., Konopásek J., Thompson A.B. Preservation of garnet growth zoning and the duration of prograde metamorphism // J. Petrol. 2010. V. 51. P. 2327-2347.
10. Casini L., Puccini A., Cuccuru S. et al. GEOTHERM: a finite difference code for testing metamorphic P-T-t paths and tectonic models // Comp. Geosci. 2013. V. 59. P. 171-180.
11. De Yoreo J.J., Lux D.R., Guidotti C.V. Thermal modelling in low-pressure/high-temperature metamorphic belts // Tectonophysics. 1991. V. 188. P. 209-238.
12. England P.C., Richardson S.W. The influence of erosion upon the mineral facies of rocks from different metamorphic environments // J. Geol. Soc. London. 1977. V. 134. P. 201-213.
13. England P.C., Thompson A.B. Pressure-temperature-time paths of regional metamorphism I. Heat transfer during the evolution of regions of thickened continental crust // J. Petrol. 1984. V. 25. P. 894-928.
14. Kramers J.D., Kreissig K., Jones M.Q.W. Crustal heat production and style of metamorphism: a comparison between two Archean high grade provinces in the Limpopo Belt, S. Africa // Precambrian Res. 2001. V. 112. P. 149-163.

15. Lewis T.J., Hyndman R.D., Flück P. Heat flow, heat generation, and crustal temperatures in the northern Canadian Cordillera: thermal control of tectonics // *J. Geophys. Res.* 2003. V. 108. B6. P. 2316.
16. Mareschal J.-C., Jaupart C. Radiogenic heat production, thermal regime and evolution of continental crust // *Tectonophysics*. 2013. V. 609. P. 524-534.
17. Neumann N., Sandiford M., Foden J. Regional geochemistry and continental heat flow: implications for the origin of the S. Australian heat flow anomaly // *Earth Planet. Sci. Lett.* 2000. V. 183. P. 107-120.
18. Pasquale V., Verdoya M., Chiozzi P. Heat flux and seismicity in the Fennoscandian Shield // *Phys. Earth Planet. Inter.* 2001. V. 126. P. 147-162.
19. Peacock S.M. Thermal modeling of metamorphic pressure-temperature-time paths / *Metamorphic Pressure-Temperature-Time Paths*. Spear F.S., Peacock S.M. Short Course in Geology. V. 7. Washington: Amer. Geophys. Union, 1989. P. 57-102.
20. Selverstone J. Petrologic constraints on imbrication, metamorphism, and uplift in the SW Tauern Window, Eastern Alps // *Tectonics*. 1985. V. 4. P. 687-704.
21. St-Onge M.R. Zoned poikiloblastic garnets: P–T paths and syn-metamorphic uplift through thirty kilometers of structural depth, Wopmay orogen, Canada // *J. Petrol.* 1987. V. 28. P. 1-21.
22. Vance D., Holland T. A detailed isotopic and petrological study of a single garnet from the Gassetts Schist, Vermont // *Contrib. Miner. Petrol.* 1993. V. 114. P. 101-118.

Zr-Hf ОТНОШЕНИЕ АКЦЕССОРНОГО ЦИРКОНА БАДЬЯЮСКОГО МАССИВА, ПРИПОЛЯРНЫЙ УРАЛ

Денисова Ю. В.

Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, г. Сыктывкар

В статье представлены результаты изучения акцессорного циркона Бадьяюского гранитного массива. По ZrO_2/HfO_2 отношениям определены генерации минерала. Сделаны выводы о геодинамических условиях формирования Бадьяюского массива.

Бадьяюский массив протягивается на 10 км вдоль западного склона Народо-Итьинского кряжа, пересекая долины рек Малая и Большая Бадьяю в верховьях, затем прослеживается далее на юг до р. Селемью. Он является продолжением расположенного северней Лемвинского гранитного массива. По минеральному составу граниты однообразны и представляют собой лейкократовые породы, сложенные в основном щелочным Na-K полевым шпатом (50-65 %) и кварцем (25-30) с незначительным содержанием кислого плагиоклаза (до 10) и альбита (1-25). Всегда присутствуют биотит (1-3), серицит и мусковит (до 7-8), нередко эпидот, хлорит, цоизит. В качестве акцессорных характерны циркон, апатит, сфен, лейкоксен, флюорит, встречаются ортит, гранат. Рудные минералы представлены преимущественно сульфидами: пиритом, халькопиритом, молибденом, галенитом, сфалеритом. Обычны гематит и магнетит.

Цирконы Бадьяюского гранитного массива отличаются по окраске, облику кристаллов и удлинению. Выделяют четыре морфотипа [2-4]. 1-й тип наиболее распространён и представлен бесцветным прозрачным короткопризматическим цирконом. Облик кристаллов обусловлен развитием призм (110), (100) и дипирамид (111), (331). Размер кристаллов 0.15-0.25 мм. Коэффициент удлинения 1.0-2.0. Поверхность граней гладкая, блестящая. Часты включения кварца, апатита. Содержание цирконов 1-го типа 65-75 % от общего объёма минерала в породе.

Тёмно-коричневый короткопризматический прозрачный циркон выделен во 2-й морфотип. Облик кристаллов идиоморфный. Развита грани (100), (110). Присутствует дипирамида (111), иногда (331). Размер таких кристаллов 0.05-0.15 мм. Коэффициент удлинения 1.0-1.5. Поверхность гладкая, блестящая. Среди включений часты кварц, апатит. Содержание цирконов 2-го типа 15-25 % от общего объёма минерала в породе.

3-й морфотип составляют бесцветные прозрачные цирконы длиннопризматического габитуса. Размер кристаллов 0.5-0.9 мм, коэффициент удлинения 2.5-4.0. Идиоморфный облик кристаллов обусловлен развитием граней (100), (110), (331). В отдельных зёрнах отмечаются включения кварца. Содержание циркона 3-го морфотипа 10-15 % от общего содержания минерала в породе.

4-й морфотип – тёмно-коричневый циркон длиннопризматического габитуса. Размер кристаллов 0.6-0.8 мм, коэффициент удлинения 2.0-3.5. Поверхность гладкая, блестящая. Облик обусловлен развитием граней (100), (110), (331). В некоторых кристаллах отмечаются включения кварца. Содержание циркона этого морфотипа 1-5 % от общего содержания минерала в породе.

Геохимические особенности циркона отражают физико-химические изменения в среде минералообразования, что позволяет получить информацию о формировании породы. Состав элементов – примесей разнообразен, при этом значительная часть приходится на долю Hf, что позволяет использовать Hf^{4+} в качестве одного из основных индикаторов. Отличительная особенность поведения Hf – его постепенное накопление относительно Zr^{4+} при формировании породы. Кроме того, величина $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ зависит от петрографического состава породы. Так, для цирконов из коровых гранитов $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ составляет 35-45, из габбро 118-135 и т. д. [1, 5].

Для каждого морфотипа циркона Бадьянского массива определены отношения $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ (табл. 1). Их величина не превышает 60, что характерно для коровых гранитоидов. Построены гистограммы отношений $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ (рис. 1). Учитывая, что от ранних фаз гранитоидных комплексов к более поздним при стабильных условиях происходит уменьшение $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$, каждый морфотип можно рассматривать как отдельную генерацию минерала. По результатам микрозондового анализа 1-й морфотип, характеризующийся наименьшей величиной $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ (41.89), является поздней генерацией, 2-й морфотип с наибольшей величиной $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ (53.50) – ранней генерацией.

Для применения статистических методов к изучаемым выборкам необходимо проверить согласованность распределения эмпирических данных с нормальным законом с помощью критерия согласия Пирсона (табл. 2) [7].

Для всех морфотипов выполняется неравенство $\chi^2_{\text{расчет}} < \chi^2_{\text{крит}}$, что позволяет сделать вывод о нормальном распределении исходных данных. На гистограммах отмечается следующая тенденция. Для цирконов I типа $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ приходятся на интервал 34-52 с двумя пиками (36-38 и 40-42) (рис. 1а). Граничные $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ для цирконов II типа составляют 44-60 с двумя повышениями на интервалах 46-50 и 56-58 (рис. 1б). Графики для III и IV морфотипов имеют унимодальный характер (III тип – интервал 38-56 с пиком на 48-50; IV тип – интервал 40-58 с пиком на 50-52). Визуально выявленную бимодальность гистограмм для I и II морфотипов проверим с помощью метода Голдина [7]. Выдвинем гипотезу об унимодальности распределений.

Для I морфотипа ($t_{\text{расчет}} > t_{\text{крит}}$), в отличие II, гипотеза об унимодальности распределения не подтвердилась. Гистограммы распределения $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ для II, III, IV морфотипов унимодальны, что позволяет говорить о кристаллизации минерала в тектонически спокойной обстановке с выделением на каждой стадии генерации циркона. Предположение о том, что каждый морфотип циркона представляет самостоятельную генерацию, подтверждается гистограммой суммарного распределения $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ отноше-

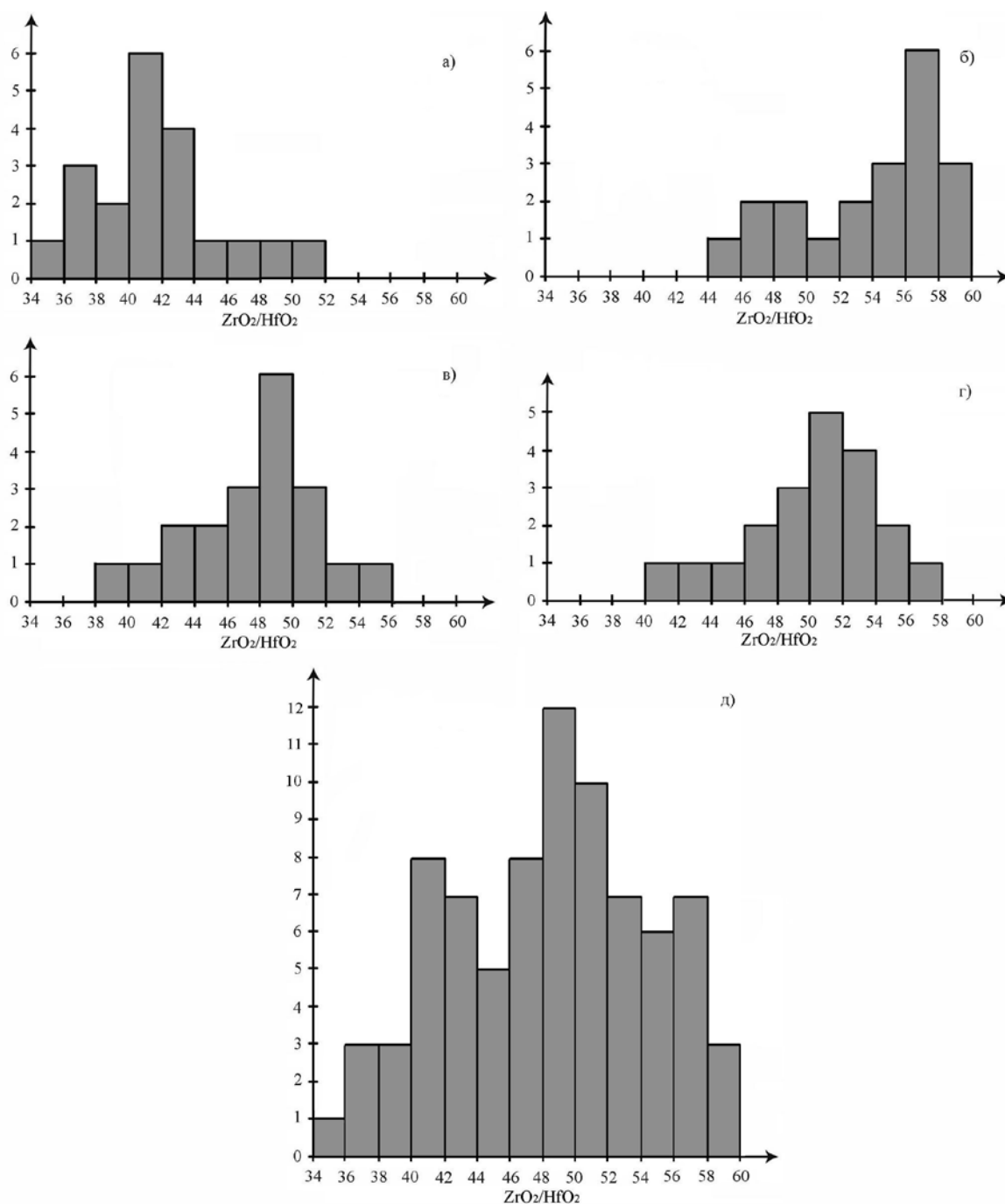


Рис. 1. Частота встречаемости ZrO_2/HfO_2 соотношений в цирконах Бадьяюского массива: а) I морфотип; б) II морфотип; в) III морфотип; г) IV морфотип; д) суммарное распределение частоты встречаемости.

ний. На гистограммах для III и IV морфотипов видно, что средние величины ZrO_2/HfO_2 близки (47.46 для III; 49.98 для IV), также имеют место перекрывающиеся диапазоны ZrO_2/HfO_2 , на основании чего можно говорить о целесообразности проверки гипотезы о равенстве средних [7].

Таким образом, статистическая проверка гипотезы о равенстве средних с помощью критерия Стьюдента подтверждает отсутствие расхождения величин ZrO_2/HfO_2 для цирконов III и IV типов, что позволяет объединить их в одну генерацию.

Таблица 1. Содержания ZrO_2 , HfO_2 и их отношение в аксессуарных цирконах Бадьяюского массива.

№ ан/	Морфологический тип											
	I			II			III			IV		
	ZrO_2	HfO_2	ZrO_2/HfO_2	ZrO_2	HfO_2	ZrO_2/HfO_2	ZrO_2	HfO_2	ZrO_2/HfO_2	ZrO_2	HfO_2	ZrO_2/HfO_2
1	64.55	1.56	41.38	64.75	1.32	49.05	65.02	1.52	42.78	65.29	1.26	51.88
2	64.59	1.52	42.51	64.81	1.39	46.63	65.62	1.41	46.54	64.25	1.28	50.12
3	64.51	1.56	41.35	64.78	1.31	49.45	65.03	1.52	42.78	65.82	1.38	47.70
4	64.12	1.29	49.71	64.45	1.22	52.93	64.07	1.32	48.54	63.54	1.28	49.60
5	65.38	1.56	41.91	64.5	1.38	46.74	65.24	1.33	49.05	64.46	1.16	55.57
6	65.23	1.56	41.81	64.63	1.13	56.98	64.67	1.37	47.20	64.29	1.29	50.02
7	64.58	1.75	36.90	65.4	1.21	54.17	64.75	1.45	44.77	64.8	1.34	48.20
8	64.45	1.64	39.30	65.36	1.11	58.88	65.02	1.69	38.58	64.52	1.58	40.84
9	64.89	1.45	44.75	65.21	1.18	55.26	64.47	1.25	51.56	64.12	1.43	44.84
10	64.68	1.78	36.34	65.18	1.19	54.77	65.03	1.19	54.66	64.02	1.39	46.03
11	64.23	1.51	42.62	64.7	1.15	56.26	65.02	1.22	53.30	64.55	1.23	52.48
12	64.25	1.34	47.87	64.12	1.08	59.37	65.23	1.28	51.03	64.33	1.19	54.06
13	65.02	1.50	43.31	64.68	1.12	57.75	64.75	1.61	40.22	64.87	1.32	49.14
14	64.47	1.54	41.86	65.08	1.16	56.10	64.78	1.32	49.08	65.88	1.17	56.18
15	64.04	1.49	42.93	65.75	1.16	56.68	65.02	1.35	48.16	65.98	1.25	52.88
16	64.22	1.68	38.23	65.08	1.12	58.11	66.02	1.32	50.12	64.71	1.52	42.52
17	64.25	1.56	41.19	64.89	1.28	50.6	65.15	1.33	49.01	65.78	1.25	52.62
18	65.03	1.26	51.61	64.56	1.42	45.46	65.74	1.40	46.88	64.98	1.28	50.77
19	65.02	1.89	34.40	64.58	1.33	48.56	65.13	1.42	45.87	65.59	1.27	51.56
20	65.02	1.72	37.80	65.44	1.16	56.20	65.25	1.33	49.12	64.11	1.22	52.55
Среднее	—	—	41.89	—	—	53.50	—	—	47.46	—	—	49.98
σ	—	—	4.20	—	—	4.35	—	—	4.00	—	—	3.95
$V, \%$	—	—	10.03	—	—	8.13	—	—	8.44	—	—	7.90

Примечание. Место отбора пробы: в истоках р. Бадьяю, на левом берегу ручья в 300 м выше левого притока (серые граниты). Микронзондовый анализ выполнен в ИГ Коми НЦ УрО РАН, Vega3 Tescan, аналитик Шевчук С.С.

На основании установленных особенностей в распределении величин ZrO_2/HfO_2 можно сделать предположение о полигенной природе массива, что находит отражение в нескольких выявленных генерациях циркона, характеризующих отдельные стадии его формирования. Становление Бадьяюского гранитного массива началось с плавления сиалического основания коры и

внедрении расплава ($\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2 = 57\text{-}95$ для циркона гранитоидного генезиса) [6], что привело к кристаллизации раннемагматической генерации циркона (II тип). За счёт поступления дополнительных объёмов магмы повышалась температура и уменьшалась вязкость расплава. Эти изменения дали начало выделению среднемагматической генерации (длиннопризматических разновидностей): зарождение IV типа и позже (с небольшим временным отрывом) III типа акцессорного циркона. По мере продвижения расплава температура минералообразующей среды снижалась за счёт переплавления прорываемых пород. Это позволило образоваться последней (позднемагматической) генерации циркона, кристаллизация которой продолжалась до остывания массива, на что указывает преобладание I типа акцессорного циркона.

Таблица 2. Проверка гипотезы о нормальном распределении $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ в цирконах Бадьянского массива.

Морфотип	Критерий согласия Пирсона		
	Число интервалов	$\chi^2_{\text{расчет}}$	$\chi^2_{\text{крит}}$
I	9	3.667	12.6
II	8	7.083	11.1
III	9	1.583	12.6
IV	9	1.667	12.6

Примечание. $\chi^2_{\text{расчет}}$ – расчётный критерий Пирсона; $\chi^2_{\text{крит}}$ – табличное значение критерия Пирсона.

Таблица 3. Проверка гипотезы об унимодальности распределения $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ в цирконах Бадьянского массива.

Морфотип	Сумма частот	Частоты			$t_{1\text{расчет}}$	$t_{\text{крит}}$
		1-й максимум	2-й максимум	минимум		
I	20	3	6	1	2.22	1.96
II	20	2	6	1	1.88	1.96

Примечание: $t_{1\text{расчет}}$ – расчётный критерий; $t_{\text{крит}}$ ($q = 0.05$) – табличное значение критерия Стьюдента.

Таблица 4. Проверка гипотезы о равенстве средних значений $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$ в цирконах Бадьянского массива.

Морфотипы	Среднее значение $\text{ZrO}_2/\text{HfO}_2$	Дисперсия	Сумма частот	$t_{2\text{расчет}}$	$t_{\text{крит}}$
I	41.89	17.64	20	4.29	2.02
III	47.46	16.00	20		
III	47.46	16.00	20	1.96	2.02
IV	49.98	15.60	20		
IV	49.98	15.60	20	3.54	2.02
II	53.50	18.92	20		

Примечание: $t_{2\text{расчет}}$ – расчётный критерий; $t_{\text{крит}} = t(38; 0,05)$ – табличное значение критерия Стьюдента.

Список литературы

1. Багдасаров Э.А. Индикаторное значение Zr-Hf отношения цирконов // Типоморфизм, синтез и использование циркона. Киев, 1989. С. 59-64.
2. Денисова Ю.В. Акцессорные минералы гранитов А-типа Приполярного Урала // Матер. Всерос. научн. конф. «Уральская минералогическая школа – 2010». Екатеринбург, 2010. С. 187-189.
3. Денисова Ю.В. Типоморфические и типохимические особенности акцессорных цирконов гранитоидов Приполярного Урала // Вестник ИГ Коми НЦ УрО РАН. 2014. № 5. С. 9-16.
4. Денисова Ю.В. Особенности акцессорных минералов гранитных массивов Приполярного Урала // Геология европейского севера России. Тр. ИГ Коми НЦ УрО РАН. Вып. 125. Сыктывкар, 2009. С. 62-72.
5. Золотарёва Г.С., Ненахов В.М. Акцессорные минералы и типоморфизм цирконов гранитов Даховского кристаллического массива, Зап. Урал // Вестник ВГУ. Сер. геология. 2006. № 1. С. 39-44.
6. Ляхович В.В. «Цирконовый метод»: достоинства и недостатки. Ст. II // Вестник ВГУ. Сер. геология. 2000. № 9. С. 124-127.
7. Овчинников Л.Н., Коган Р.Н. О применении методов математической статистики в абсолютной геохронологии // Статистические методы геологических исследований. 1971. Вып. 2. С. 90.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПРИРОДНЫХ УСЛОВИЙ XIX-XX вв. ПО КЛИМАТИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНЫМ РЯДАМ (НА ПРИМЕРЕ ХИБИН)

Дёмин В.И.¹, Волков А.В.²

Полярный геофизический институт КНЦ РАН, г. Апатиты
Управление по ПБ и ОТ АО «Апатит», г. Кировск

Введение

Первые метеорологические наблюдения в Хибинах начались в 1929-1930 гг. с открытием метеорологических станций «Хибины – горная» (абс. отм. 760 м) и «Апатитовая гора» (360 м). В 1933 г. метеорологические наблюдения были организованы в г. Кировск (355 м), в 1936 г. на г. Юкспор (902 м). Указанные станции в последующие годы были закрыты. И сегодня самая длинная и продолжающаяся серия метеорологических наблюдений есть только на горно-лавинной станции «Центральная» (г. Ловчорр, 1091 м) АО «Апатит». Измерения здесь ведутся с 1962 г. Но во многих случаях (например, для выявления отклика ландшафтной среды на происходящие изменения климата) даже 60 лет оказывается недостаточным. Для этих целей требуются ряды большей длины, которые создаются из измерений на различных станциях, имеющих период параллельной работы.

Первая реконструкция климата региона в XIX в. по инструментальным данным была основана на сходном характере долговременных колебаний температуры в Коле, Апатитах (ГМС «Хибины») и Архангельске, где наблюдения за температурой начались с 1813 г. [1]. Такое подобие колебаний среднемесячных и тем более сезонных температур на расстояниях, часто достигающих сотен км, создаётся связанностью крупномасштабных атмосферных процессов, следствием которой является большая устойчивость разностей или отношений соответствующих метеорологических элементов.

Это позволяет строить уравнения регрессии между исследуемой метеорологической станцией и аналогом, обладающим большей длиной ряда, по данным за период совместной работы, и выполнять последующий расчёт по найденному выражению значений на искомой станции в отсутствующие годы по их значениям на станции-аналоге. Критерии реконструкции [2, 3]:

$$n \geq 6 \div 10, \quad r \geq A_{кр}, \quad k / \sigma_k \geq B_{кр},$$

где n – число лет с параллельными наблюдениями, r – коэффициент парной или множественной корреляции между значениями метеорологической величины в приводимом пункте и их значениями в пункте-аналоге. $A_{кр}$ – критическое значение коэффициента корреляции (обычно ≥ 0.7), k – коэффициент уравнения регрессии, σ_k – его средняя квадратичная погрешность; $B_{кр}$ – критическое значение отношения k/σ_k (обычно ≥ 2).

Несмотря на то, что полученные в [1] результаты цитируются в научной литературе, обстоятельства получения температурного ряда в Архангельске остались без внимания. Длительный температурный ряд по Архангельску, несмотря на то, что может быть взят с сайтов ряда климатических центров под единым именем, на самом деле состоит из объединённых данных в разных частях города с разными микроклиматическими условиями [4]. До 1870 г. измерения температуры проводились с термометров на стенах дома или у окна. Коррекцией показаний никто не занимался и она не представляется возможной. «Что касается установки термометров у окна, то надёжно определить степень расхождения данных, полученных при этой установке, с соответствующими данными, полученными при установке в будке, нелегко, так как показания термометра при установке его у окна сильно зависят от дополнительных условий: ориентации относительно сторон света, деревянной или каменной стены, отапливаемого или неотапливаемого помещения и т.п. Удаётся грубо оценить только порядок этих расхождений. Лучше поэтому избежать включения в рассмотрение периода, когда наблюдения приводились при такой установке» [5]. Реконструируя по Архангельску температурный ряд в Хибинах, мы не сможем отделить изменения, вызванные изменениями климата, от изменений, обусловленных другими факторами. Этот пример иллюстрирует актуальную проблему климатологии – когда к недостаточности наблюдений добавляется проблема климатической неоднородности, часто сводящая на нет всю серию длительных измерений.

По определению, климатически однородным считается ряд, характеристики которого меняются год от года или от некоторого периода к другому только в соответствии с естественной изменчивостью макропроцессов, оказывающих влияние на погоду и климат региона и не содержат эффектов, вызванных сменой методики измерения, типа измерительного прибора, переносом измерительной площадки или неестественным изменением окружающей местности. Можно уверенно сказать, что нет ни одного продолжительного температурного ряда, который в первоначальном виде пригоден для решения климатических задач. Но игнорирование неоднородности может повлечь за собой серьёзные последствия (наиболее впечатляющим из них может быть смена знака долговременной тенденции температуры). По этой причине реконструкция температурных рядов возможна только по климатически (или методически) однородным рядам. Цель данной работы – реконструкция климатических условий Хибин и проверка вероятности сохранения снежного покрова в XIX в. В работе использованы данные ВНИИГМИ-МЦД (Обнинск), Центра лавинной безопасности ОАО «Апатит», Норвежского метеорологического института (Norwegian Meteorological Institute) и данные, опубликованные в сериях «Климатологический справочник СССР. Метеорологические данные за отдельные годы» и ежемесячниках [6-8]. Заметим, что публикация данных в официальных изданиях или на сайтах климатических центров не гарантирует их однородности. «В настоящее издание по всем та-

блицам не вошли только забракованные величины. Доброкачественные же, но с неоднородным рядом, данные в это издание включены» [7]. То есть, проверка климатической однородности и внесение поправок предоставляется потребителю метеорологической информации.

Использованные данные и методы

На протяжении долгого времени в климатологии существовала процедура проверки однородности рядов путём анализа разности или отношения синхронных значений метеорологических величин на соседних станциях [9]. В основу метода положена малая изменчивость разностей или отношений по сравнению с самими значениями. Как правило, в задачах климатологии такая разность или отношение принимались постоянными. Это было обнаружено в начале XIX в. [5] и впоследствии использовано при составлении климатических справочников, где проводилось приведение данных всех гидрометеорологических станций с неполным рядом наблюдений к единому периоду методом разностей или отношений. В качестве объяснения такого постоянства приводится тот факт, что атмосферные процессы синоптического масштаба охватывают большие пространства и сказываются на данных соседних станций примерно одинаково. В этом случае резкое изменение разности или отношения, начиная с какого-то года, по сравнению с предыдущим периодом можно рассматривать как признак неоднородности.

Но в последние десятилетия благодаря автоматизации расчетов обнаружено, что утверждение об относительном постоянстве разностей и отношений не правильно. Этим рядам, как и рядам метеорологических величин, свойственны колебания от одного периода к другому из-за естественной изменчивости атмосферных процессов. Из-за особенностей положения сравниваемых станций различия могут быть не одинаковыми при разных процессах. По этой причине метод разностей (отношения) стал вытесняться анализом самой величины. В современной климатологии для анализа однородности рядов с одинаковым успехом используют оба метода, причём комбинация нескольких методов с обязательным привлечением истории станции и других дополнительных факторов (часто субъективных) даёт наилучшие результаты. Существует ряд приёмов оценки климатической неоднородности по ряду метеорологической величины.

1. Стандартный нормальный тест для проверки однородности (SNHT). Имеется ряд метеорологической величины $Y_1, \dots, Y_n$. Проверяется возможность нарушения однородности в момент v . Ряд разбивается на 2 части, содержащий v и $n-v$ членов.

$$T_v = v(\bar{z}_1)^2 + (n-v)(\bar{z}_2)^2,$$

где $\bar{z}_1$ и $\bar{z}_2$ – средние значения первой и второй половины ряда.

2. Тест Буишанда. Если ряд однороден, то ряд из разностей $y - y_i$ – случайный, а сумма $\Sigma (y - y_i)$ близка к нулю. Если в v -ый год произошло нарушение однородности, то сумма разностей, симметричных относительно момента нарушения однородности, достигает экстремума.

3. Непараметрический тест Петита. Ряд метеорологической величины $Y_1, \dots, Y_n$ ранжируется, а полученные $r_1, \dots, r_n$ ранги используются для расчёта статистики

$$X_k = 2 \sum r_i - k(n+1)$$

$$X_E = \max_{1 \leq k \leq n} |X_k|$$

4. Отношение Фон-Ноймана

$$N = \frac{\sum_{i=1}^{n-1} (Y_i - Y_{i+1})}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})}$$

Найденные значения T_v , S , X_k , N сравниваются с критическими. В случае превышения можно предполагать нарушение однородности. Эти приёмы проверки однородности были использованы при отборе метеорологических станций при реконструкции климатических условий в Хибинах с начала XIX в.

Результаты и обсуждение

Метеорологические наблюдения на г. Ловчорр начались с 1962 г. В 1964 г. метеорологическая площадка перемещена в другое место с изменением высоты с 1050 до 1091 м. Подъём метеорологической площадки на 41 м эквивалентен понижению температуры на 0.2°C. Таким образом, данные до 1964 г. для составления единого ряда должны быть исправлены на это значение (в среднем). Без введения поправки тренд с 1962 г. будет занижен. Метеорологическая площадка на г. Юкспор сменила положение в 1962 г. Она перенесена на 300 м к северу, высота изменилась с 902 до 910 м. Нарушения однородности температурного ряда при переносе не произошло. Учитывая, что между среднемесячными и среднесезонными температурами на г. Ловчорр и г. Юкспор в период их совместной работы (1964-1980 гг.) имеется высокая корреляция (0.991-0.997), ряд по г. Ловчорр можно надёжно продлить к началу наблюдений на г. Юкспор в 1936 г.

Ряд по г. Ловчорр можно продлить к 1925 г. используя период параллельных наблюдений (1964-1978 гг.) на г. Ловчорр и ГМС «Хибины, оп. поле». Отметим, что на метеорологической сети с 1871 по 1935 гг. измерения проводились в 7, 13 и 21 час. (ранее существовали и иные комбинации сроков, ночных измерений не было). По этой причине температуры оказываются завышенными. В [11, 12], где собраны наиболее данные по 1950 г., на среднемесячные значения введены поправки. Но можно встретить и неис-

правленные значения (например, нельзя корректно исправить среднесуточные значения). При точных расчетах средняя суточная температура воздуха, вычисленная из трёх и четырёх сроков наблюдений, приводится к средней температуре за сутки введением поправок, которые представляют собой разность между средней за 24 часа по ежечасным данным термографа и средней за 3-4 срока наблюдений. Такие поправки для северных станций не вводятся только для восьмисрочных наблюдений, как правило, с 1966 г.

Самая ранняя и длительная серия измерений температуры на Кольском п-ове имеется в г. Кола. Метеорологические наблюдения начаты здесь в 1878 г. Положение станции менялось незначительно. С 1893 г. будка с термометрами располагается на обширном лугу. Верхняя часть её наиболее высокой стороны открыта и обращена на северо-запад. С сентября 1900 г. термометры перенесены в будку Вильда, с октября 1912 г. – в «английскую» будку. Так как «разность в показаниях термометров, установленных в будке Вильда без вентиляции и с вентиляцией в зависимости от её интенсивности может составлять в летние месяцы от 0.1 до 0.7-0.8°C в месячном среднем» [5], у нас есть три возможных даты нарушения однородности в ряду ранних наблюдений на станции Кола: 1893, 1900, 1912 и 1965 г. (новый перенос). Применение упомянутых выше тестов (SNHT, Буишанда, Петита, Фон-Ноймана) к ряду наблюдений в Коле не показывает неоднородности. В этой связи можно удлинить температурный ряд на г. Ловчорр до 1878 г. Но лучше воспользоваться не только рядом в Коле, а привлечь ещё наблюдения в Вардё (Норвегия) и Торнедалене (Швеция).

История метеорологических наблюдений в Вардё и процедура гомогенизации даны в [17]. Однородный ряд данных с 1840 г. предоставлен Norwegian Meteorological Institute. Самый длительный температурный ряд в северной Скандинавии получен для Торнедалена на границе Финляндии и Швеции, удалённого от г. Ловчорр на 470 км. Он составлен из наблюдений в г. Хапаранда с августа 1859 г., а к 1802 г. продлён по сериям параллельных наблюдений в 1802-1862 гг. Хапаранде, Оверторнио и Каликс. Данные по Торнедалену и описание процедуры получения приведены в [18]. Использование трёх станций вместо одной повышает надёжность реконструкции. Это можно заметить по снижению коэффициента корреляции при уменьшении числа станций, используемых при построении регрессий. Например, коэффициенты множественной корреляции между рядами зимних, весенних, летних, осенних и среднегодовых температур на г. Ловчорр и указанными тремя станциями составляют 0.965, 0.956, 0.962 и 0.976 для периода 1964-2013 гг. При оставлении в регрессии данных Вардё и Торнедалена – 0.934, 0.901, 0.867, 0.965; только Торнедалена – 0.86, 0.83, 0.784, 0.897.

Использование регрессий предполагает, что температурный режим конкретного года в Хиби́нах будет восстановлен с некоторой ошибкой. В случае приведения по близкорасположенной станции «Юкспор» среднеквадратичная ошибка (СКО) всего около 0.1°C. Но при восстановлении ряда на г. Лов-

чорр мультирегрессией по Вардэ и Торнедалену СКО достигает 0.43, 0.69, 0.63 и 0.40 °С для зимних, весенних, летних и осенних температур, только по Торнедалену – 0.61, 0.88, 0.78 и 0.67 °С. Для оценки погодных условий конкретного года это много. Но эта ошибка не скажется на долгосрочном тренде и, во-вторых, климат описывается как среднее значение некоторых параметров за многолетний период (от 30 лет и более). Так как СКО арифметического среднего за n лет в $\sqrt{n}$ раз меньше ошибки одного восстановления, точность оценки климатических ресурсов в виде среднего за многолетний период существенно возрастает. В этом плане, например, восстановленная средняя температура за 1802-1881 гг. будет весьма достоверной.

Последние рассуждения подходят только для случая, если измерения на станциях-аналогах корректны. Но уверенности в этом нет. Так, ряд по Торнедалену считается качественным до 1832 г. [18]. Более ранние данные (в первую очередь летние температуры) менее надёжны, что вызвано недостатками радиационной защиты термометра и малыми перекрытиями рядов со станций, использованных при восстановлении ряда по Торнедалену. Тем не менее, других таких же длинных рядов в регионе нет. Надёжность реконструкции другими методами (например, дендроклиматологии) ещё меньше. И нет возможности более качественно оценить климатические условия региона начала XIX в., кроме как воспользоваться рядами инструментальных измерений.

На рис. 1 даны ряды среднесезонных и среднегодовых температур на г. Ловчорр в период с 1802 г. и их вариации после десятилетнего сглаживания; отмечены СКО восстановленных данных. Выделение сезонов на Кольском п-ове проведено по классификации [10]: зима (ноябрь-март), весна (апрель-май), лето (июнь-август), осень (сентябрь-октябрь). Горизонтальные линии соответствуют средним значениям температуры за период 1802-1880 гг., климатическим нормам 1881-1960 и 1961-1990 гг., а также средним многолетним значениям за 1980-2010 гг. Последние значения за период 1980-2010 гг. используются рядом климатических центров вместо норм 1961-1990 гг., которые считаются устаревшими на фоне климатических изменений. Как видно из рис. 1, долгосрочная тенденция к повышению температуры проявляется во все сезоны. XX в. заметно теплее XIX-го. Это видно на рис. 2, где дана динамика сглаженных по десятилетиям аномалий температуры (от средних значений за столетний период 1881-1998 гг.). Вместе с тем, это потепление не является монотонным: потепления сменялись похолоданиями. В температурном ряду прослеживаются признаки квазициклических колебаний, природа которых остаётся неустановленной.

Сравнивая обнаруженные тренды с изменениями глобальной температуры, можно предположить, что обнаруживаемое по 200-летнему ряду потепление с характерной скоростью порядка 0.5-1.5°С/100 лет отражает общую тенденцию к потеплению климата (её скорость несколько увеличена в полярных широтах). Но при таких скоростях вклад глобального потепления

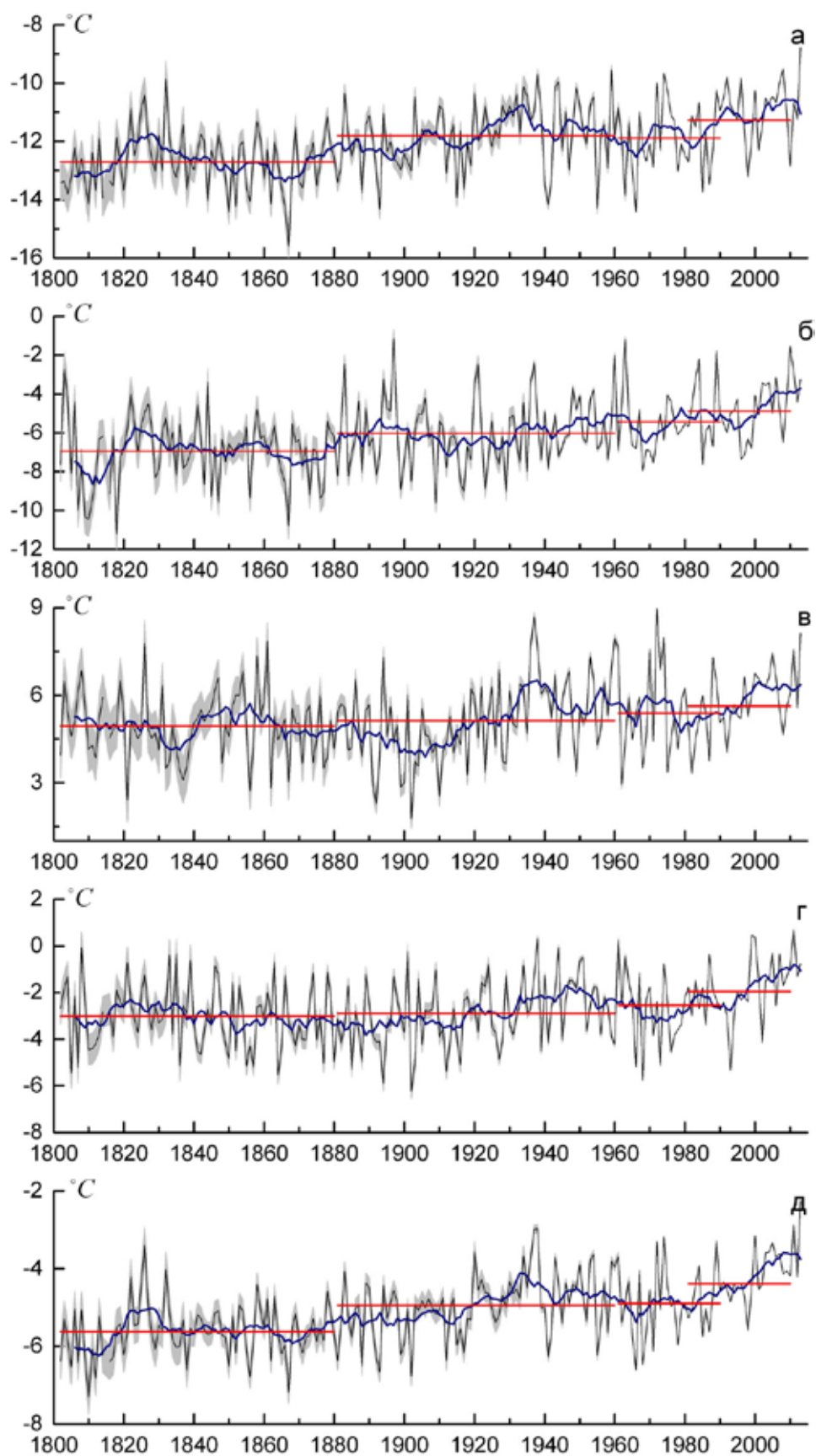


Рис. 1. Вариации среднесезонных и среднегодовых температур на г. Ловчорр с 1802 г. по 2012 г. и их сглаживание 10-летним фильтром: а – зима, б – весна, в – лето, г – осень, д – год. Серой заливкой отмечено СКО. Горизонтальные красные линии – средние многолетние температуры для 1802-1880, 1881-1960, 1961-1990 и 1991-2010 гг.

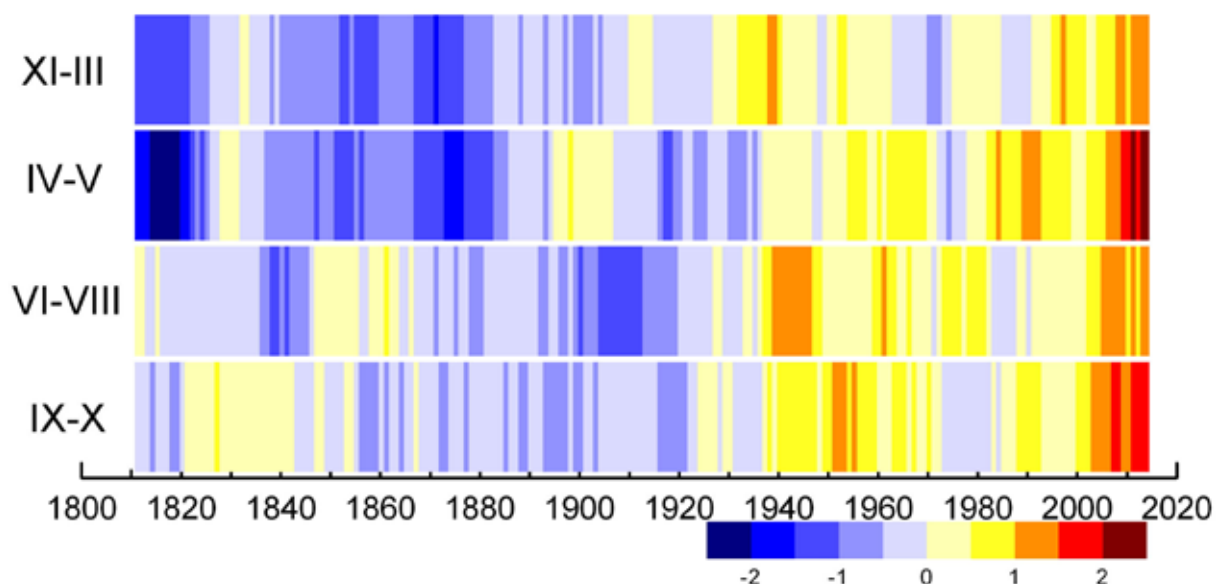


Рис. 2. Аномалии сезонных температур на г. Ловчорр (от средних многолетних значений за 1881-1980 гг.) после 10-летнего сглаживания.

в изменения региональной температуры в масштабах нескольких десятилетий очень мал. На коротких временных интервалах этот тренд маскируется другими факторами, вызывающими вариации температуры. Известно, например, что в общей циркуляции атмосферы существуют периоды, когда повторяемость одного макропроцесса или их группы заметно превышает многолетние значения – так называемые циркуляционные эпохи. Их продолжительность составляет от 10 до 30 лет по Г.Я. Вангейнгейму и 25-30 лет по Б.Л. Дзердзеевскому [11]. Каждой такой эпохе соответствует фон циркуляции и режим погоды в различных районах [12]. И каждая эпоха создаёт длительную тенденцию одного знака в многолетних изменениях характеристик атмосферы. Так, в результате вмешательства циркуляционных факторов вместо более или менее монотонного изменения температуры получаются волны потепления и похолодания. Становится очевидной опасность заключений о климатических изменениях по коротким рядам данных, не включающим несколько циркуляционных эпох. Из-за циклов потепления и похолодания представлять долговременный тренд в виде численного значения (градусы / 100 лет) невозможно, так как результат зависит от выбранного временного интервала – от того, на какой участок цикла попадает начало ряда.

Наличие волн потепления и похолодания в прошлом не даёт оснований для предположений, что тенденции последних лет необратимы. Изменения температуры в разных сезонах не всегда идут с одинаковым знаком: потепление одного сезона не обязательно сопровождается потеплением других. Поэтому сложно говорить о единых периодах потепления или похолодания. Такое несовпадение знаков сезонных тенденций может указывать на их циркуляционную обусловленность, ведь даже один макроциркуляционный процесс в разные сезоны может вызывать разные по знаку аномалии температуры. Так, при зональном переносе на Кольский п-ов поступает морской

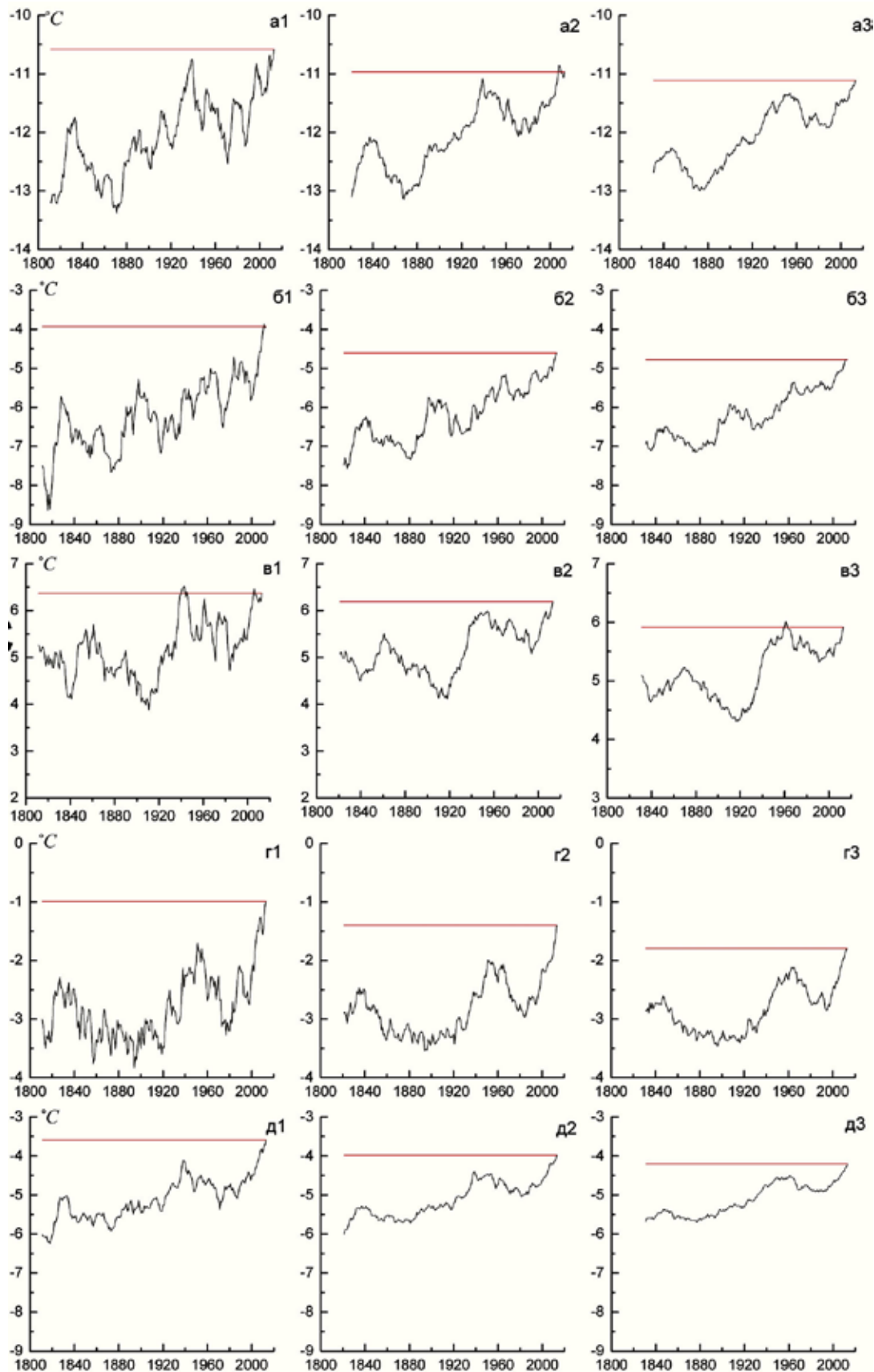


Рис. 3. Вариации средних сезонных (а – зима, б – весна, в – лето, г – осень) и годовых (д) температур на г. Ловчорр после 10-летнего (а1, б1, в1, г1, д1), 20-летнего (а2, б2, в2, г2, д2) и 30-летнего (а3, б3, в3, г3, д3) сглаживания. Красной чертой отмечена средняя температура сезона или года последнего 10-, 20- и 30-летия (индекс 1, 2 и 3).

воздух, который зимой из-за предварительного прогрева над незамерзающей акваторией будет вызывать потепление, а летом и осенью – относительно прохладную погоду. Усиление макропроцесса в одну из циркуляционных эпох по-разному отразится на температурных тенденциях отдельных сезонов. Как видно из рис. 1, зимние температуры достигли своих максимальных значений в 1930-ых, в последующий период они даже снизились. Их новое повышение началось с 1980-ых. Аналогична ситуация и с летними температурами. При этом средние зимние, весенние, осенние и среднегодовые температуры последних 10, 20 и 30 лет оказываются наиболее высокими за период с 1802 г. (рис. 3).

В 1835 г. в «Горном журнале» Н.В. Широкшин опубликовал отчёт об экспедиции по юго-западной части Кольского п-ова, в котором есть замечание: «Бывают годы, когда Кандалакшские горы не снимают с себя снежного покрова зимы. Хибин же покрыты вечным снегом». В наше время одни исследователи считают это ошибочным, так как абсолютные высоты хибинских вершин много ниже уровня, на которых снег может сохраняться 365 дней в году («уровень 365»). Кроме того, экспедиция Н.В. Широкшина закончилась во второй половине сентября, когда в Хибинах снег не редкость и в наше время. Средняя многолетняя дата появления временного снежного покрова на плато Ловчорр за 1962-2010 гг. 7 сентября, с середины третьей декады можно ожидать устойчивого залегания (средняя многолетняя

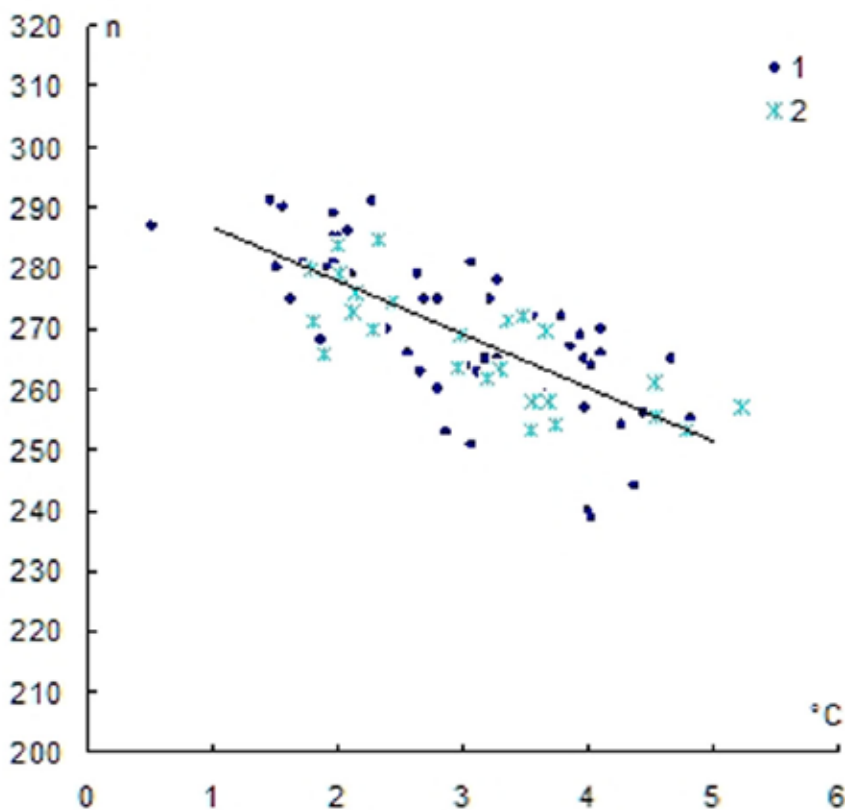


Рис. 4. Зависимость числа дней в году со снежным покровом на г. Ловчорр от средней температуры в период май-сентябрь (1 – по фактическим данным; 2 – с использованием данных по г. Юкспор).

дата 26 сентября). Так как плато Ловчорр одно из самых высоких, эти даты можно принять за начало формирования снежного покрова во всех Хибинах. В холодный сентябрь (ниже -2°C) устойчивый снежный покров в Хибинах может появиться уже в начале сентября. Таким образом, за «вечный снег» на вершинах Хибин, на которые Н.В. Широкин не поднимался, мог быть принят не снег, сохранившийся с весны, а рано выпавший снег нового зимнего сезона.

Вместе с тем, у версии Н.В. Широкина есть немало сторонников, которые рассматривают его замечание как свидетельство более холодного, чем в настоящее время, климата [13-16]. «По-видимому, Широкин на Кольском п-ове застал то время, которое характеризовалось большой снежностью и было синхронно «малому ледниковому периоду» в Альпах и наступанию ледников на Кавказе» [16]. Чтобы ответить на вопрос о возможности сохранения снежного покрова в Хибинах в летний сезон, воспользуемся тем, что его присутствие или отсутствие в тёплое время года должно зависеть, прежде всего, от температуры воздуха. По этой причине число дней в году со снежным покровом отрицательно коррелирует ($r = -0.74$) со средней температурой мая-сентября (рис. 4). Это позволяет восстановить продолжительность снежного покрова в Хибинах в период отсутствия метеорологических наблюдений. Как видно на рис. 5, число дней со снежным покровом на плато Ловчорр в XIX в. не превышало 300-310 несмотря на более холодные условия. Так как плато Ловчорр одно из самых высоких в Хибинах, условия для сохранения снега на меньших высотах были, очевидно, менее благоприятными.

Следует иметь в виду, что в климатологии днём со снежным покровом считается такой, когда более половины видимой окрестности покрыто сне-

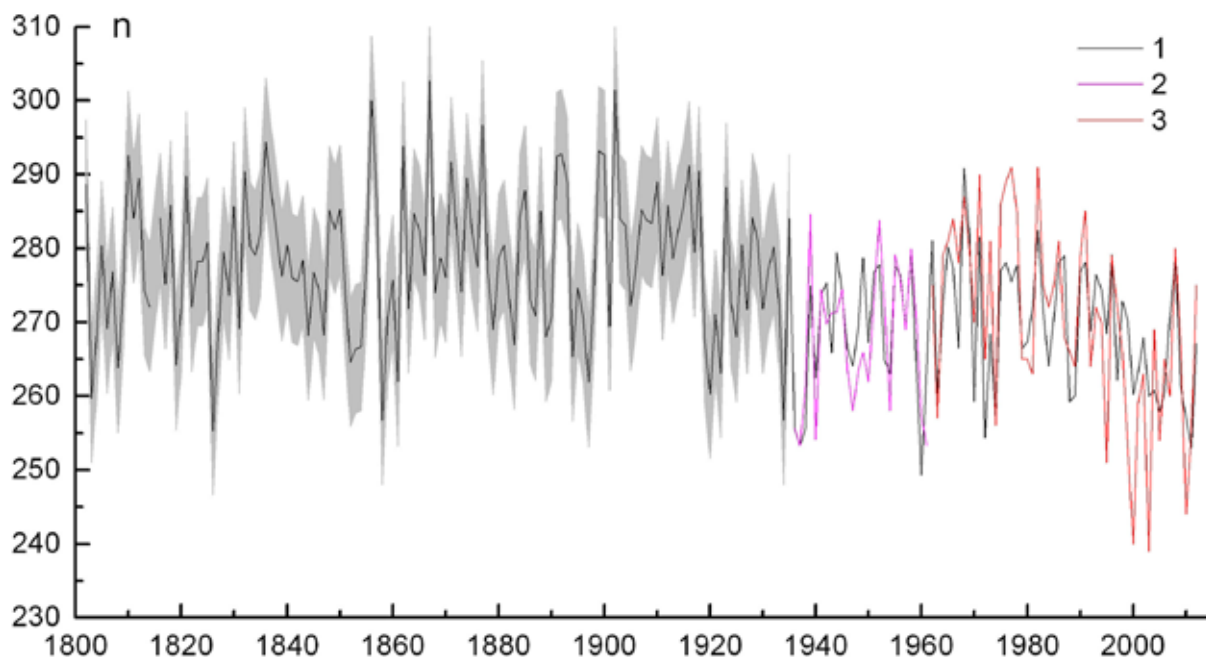


Рис. 5. Число дней со снежным покровом на г. Ловчорр: 1 – реконструированное по средней температуре за май-сентябрь (заливкой отмечено СКО); 2 – восстановленное по регрессии с числом дней на г. Юкспор; 3 – фактическое в период наблюдений.

гом. От разрушения устойчивого снежного покрова до полного исчезновения отдельных пятен снега проходит ещё до 10 дней. Тем не менее, даже с учетом временного снежного покрова, у нас нет оснований предполагать сохранение в течение всего лета снежного покрова на открытых плато в Хибинах (речь не идёт о снежниках и ледниках в расщелинах и глубоких долинах). В течение июля-августа на плато возможно выпадение осадков в виде снега (в среднем от 2 до 4, до 15 дней в месяц). Но из-за положительной температуры воздуха и подстилающей поверхности этот снег быстро тает. В среднем за июль-август только 3 дня фиксируются как дни со снежным покровом. Во-вторых, этот снежный покров не является сохранившимся с весны.

Вывод о невозможности сохранения на Хибинских вершинах снега летом до следующей зимы предполагает, что уровень зимних осадков в прошлом столетии не сильно отличался от тех, что наблюдались за период инструментальных наблюдений. Это важно, так как для разрастания горного оледенения в Хибинах достаточно удвоения – утроения твёрдых осадков [17]. Современные суммы твёрдых осадков в Хибинах (ноябрь-март) составляют около 500 мм. Если предположить их удвоение-утроение и оставить количество осадков в апреле-октябре без изменения (около 900 мм), то годовая сумма осадков достигнет 2000-2400 мм. Это значение сопоставимо с годовыми нормами осадков для многих тропических районов и представляется физически невероятным.

Провести реконструкцию ряда осадков в Хибинах аналогично температурному невозможно из-за непродолжительных измерений осадков и их низкого качества до 1950-ых. Хотя осадки и являются одним из основных климатических показателей, эффективной техники их регистрации нет. Этот параметр считается одним из наименее надежных в метеорологии. Многочисленные исследования на экспериментальных полигонах показывают, что данные наблюдений по осадкомерам содержат погрешности, особенно заметные в холодный период. Так, из-за локальной деформации поля ветра, вызванной обтеканием установки, часть капель или снежинок не попадает в приёмное отверстие. В зависимости от типа прибора (с различной ветровой защитой) количество измеренных осадков на одной измерительной площадке может меняться от 30-40 до 90-95 % от фактического. Стандартный для РФ и ряда других стран осадкомер Третьякова при скоростях ветра на уровне приемного отверстия 3, 5 и 7 м/с улавливает в среднем 70, 50 и 35 % общего количества твёрдых осадков [16]. Другая проблема измерений в Арктике и в горах – «ложные» осадки, попадающие в прибор во время метелей. Большие погрешности при измерении осадков ставят вопрос о правомерности использовании прямых измерений в климатических задачах. Вместе с тем единой методики их коррекции нет. Получаемые по разным наборам данных массивы дают сильно отличающиеся тренды даже в глобальном масштабе. Оценить количество осадков в XIX в. можно лишь после ряда допущений.

В современных климатических моделях средняя интенсивность осадков I оценивается по средней температуре воздуха:

$$\lg I = m + nT \quad [17]$$

где T – температура воздуха, m и n – постоянные для района коэффициенты. При этом действительная интенсивность выпадающих осадков на полярных станциях в первом приближении (при расчётах за несколько десятков лет) может считаться постоянной, близкой к средней многолетней интенсивности осадков в данных климатических условиях. При такой оценке сумма осадков твердого периода P будет зависеть главным образом от их суммарной продолжительности τ :

$$P = I \tau$$

Если проанализировать динамику осадков на г. Ловчорр в ноябре-марте, их суммарной продолжительности и интенсивности, то можно заметить, что именно продолжительность осадков лучше всего описывает изменения их суммы (рис. 6).

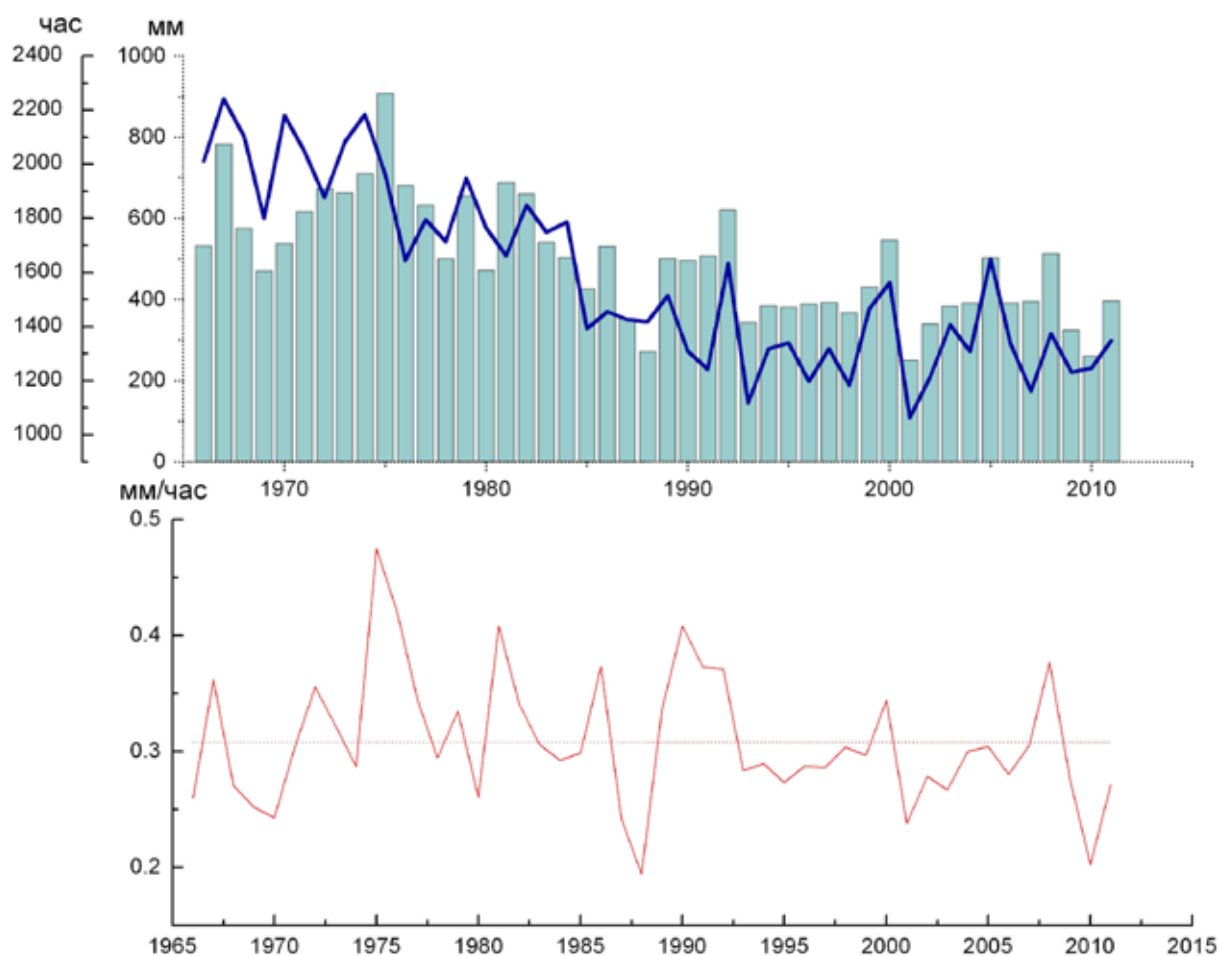


Рис. 6. Изменение суммы осадков за период ноябрь-март на г. Ловчорр (гистограмма), их суммарной продолжительности (синяя линия) и средней интенсивности (красная линия).

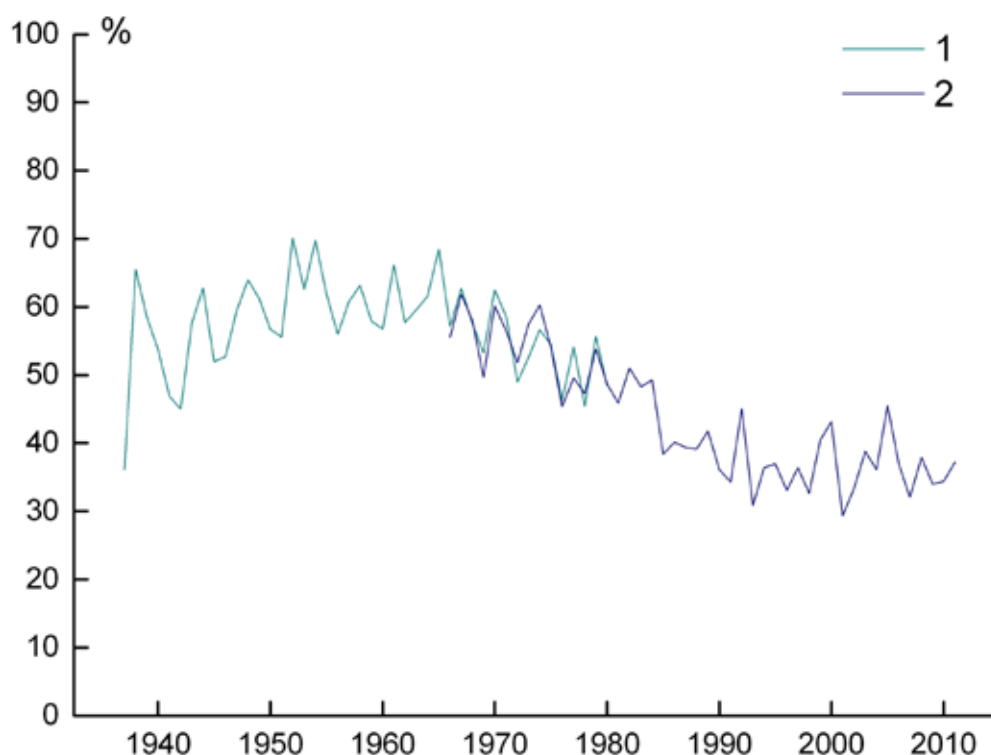


Рис. 7. Продолжительность периода с выпадением осадков в % от общего времени (ноябрь – март); 1 – г. Юкспор, 2 – г. Ловчорр.

В 1950-60-ые многоснежные зимы в Хибинах возникали за счёт большей продолжительности осадков, а не их интенсивности. В этот период осадки наблюдались в 60-70 % всего времени (рис. 7), что является предельной величиной. Трудно представить период, когда время выпадения осадков приблизилось к 90-100 %. За счёт более низкой температуры воздуха, интенсивность осадков в XIX в. должна быть ниже. В этой связи можно предположить, что многоснежные зимы в Хибинах в последние 200 лет не сильно отличались по объёмам снега от 1950-60-ых. Появление холодных и многоснежных зим в период, предшествующий экспедиции Н.В. Широкина, представляется крайне маловероятным. Во второй половине XIX в. – в период научных экспедиций В. Рамзая – сообщений о «вечном снеге» в Хибинах не было несмотря на продолжительное похолодание летнего сезона.

Заключение

С помощью приведения коротких рядов к длинным по станциям-аналогам выполнено восстановление сезонных и среднегодовых температур в на г. Ловчорр для 1802-1961 гг. Это позволило удлинить существующие с 1962 г. температурные ряды на г. Ловчорр и провести анализ климатических изменений за 211 лет.

Тенденция к долговременному потеплению климата на протяжении рассматриваемого времени прослеживается во все сезоны. Но оно не является монотонным: потепление неоднократно сменялось похолоданием. В температурном ряду прослеживаются признаки квазициклических колебаний,

природа которых остаётся неясной. Изменения температуры в разных сезонах не всегда идут с одинаковым знаком. Потепление одного сезона не обязательно сопровождается потеплением других. Поэтому сложно говорить о единых периодах потепления или похолодания. Средние зимние, весенние и осенние температуры последних 10, 20 и 30-летий наиболее высоки с 1802 г.

Число дней со снежным покровом в XIX в. было намного больше, чем в последние десятилетия. Но нет указаний на то, что снег не успевал растаять до наступления нового зимнего сезона. Многоснежные зимы 1950-60-ых являются исключительно снежными. Нет оснований предполагать, что в XIX в. снега в Хибинах было больше.

Список литературы

1. Возовик Ю.И., Лукьянова Л.М., Мягков С.М. Лавинный режим в Хибинах в течение последних 150 лет // Фитоиндикационные методы в гляциологии. М.: Изд-во МГУ, 1971. С. 32-42.
2. Физическая география СССР / Ред. Г.К. Тушинский. М.: Просвещение, 1966. 848 с.
3. Лобанов А. И., Смирнов И.А., Шадурский А.Е. Практикум по климатологии. Ч. 1: Уч. пособие. СПб.: РГГМУ, 2011. 145 с.
4. Свод правил по проектированию и строительству: СП 33-101-2003. Определение основных расчётных гидрологических характеристик. М., 2004.
5. Дёмин В.И. Неклиматические климатические изменения // Матер. гляциологических исследований. 2012. №1. С. 110-114.
6. Солонина О.Н. Горное оледенение Сев. Евразии в голоцене. М.: Научный мир, 1999. 272 с.
7. Рубинштейн Н. Г. Методы климатологической обработки метеорологических наблюдений. Л.-М.: Гидрометеиздат, 1937. 124 с.
8. Рубинштейн Е.С. Климат СССР. Ч. 1. Температура воздуха. Вып. 2. Средние месячные температуры воздуха в Европейской части СССР за отдельные годы с севера до 55 с.ш. Л.: ГГО, 1929. 180 с.
9. Климатологический справочник СССР. Вып. I. Мурманская, Архангельская области и Коми АССР. Метеорологические данные за отдельные годы. Ч. 1. Температура воздуха. Л.: Гидрометеиздат, 1956. 562 с.
10. Справочник по климату СССР. Вып. I. Мурманская обл. Метеорологические данные за отдельные годы. Ч. 1. Температура воздуха. Л.: Гидрометеиздат, 1973. 88 с.
11. Методы климатологической обработки метеорологических наблюдений под ред. О.А. Дроздова. Л.: Гидрометеиздат, 1957. 492 с.
12. Яковлев Б.А. Климат Мурманской обл. Мурманск: Мурманское кн. изд., 1961. 180 с.
13. Хромов С.П., Мамонтова Л.И. Метеорологический словарь. Л.: Гидрометеиздат, 1974. 568 с.
14. Гирс А.А. Макроциркуляционный метод долгосрочных метеорологических прогнозов. Л.: Гидрометеиздат, 1980. 250 с.

15. Перов В.Ф. Снежники, ледники и мерзлотный рельеф Хибинских гор. М.: Наука, 1968. 120 с.
16. Рябцева А.Б. Динамика оледенения Хибин в голоцене в связи с ритмами увлажнённости северного полушария // Вопросы географии. 1970. Сб. 79. С. 105-120.
17. Солонина О.Н. Горное оледенение Северной Евразии в голоцене. М.: Научный мир, 1999. 272 с.
18. Тушинский Г.К. (Ред.) Физическая география СССР. М.: Просвещение, 1966. 848 с.
19. Голубев В.С., Кокнаева В.В., Симоненко А.Ю. Результаты измерений атмосферных осадков национальными стандартными приборами Канады, России и США // Метеорология и гидрология. 1995. № 2. С. 102-110.
20. Природные условия Хибинского учебного полигона: учебное пособие по практикам студентов-географов в Хибинах. М.: Изд-во МГУ, 1986. 170 с.
21. Кобышева Н.В. (Ред.) Климат России. СПб: Гидрометеиздат, 2001. 656 с.
22. Andresen L. Homogenization of monthly long-term temperature series of mainland Norway. Norwegian Meteorological Institute, Note 2. Oslo, Norway, 2011. [http://met.no/filestore/Homog_Norway.pdf]
23. Klingbjør P., Moberg A. A composite monthly temperature record from Tornedalen in northern Sweden, 1802–2002 // Int. J. Climatology. 2003. V. 23. P. 1465-1494.

ГЕОТЕКТОНИКА И ЭВОЛЮЦИЯ ЗЕМНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Ильченко В.Л.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, vadim@geoksc.apatity.ru

На базе гипотезы расширяющейся Земли дан прогноз развития земной поверхности с кольцевыми вариациями прочности горных пород – результат их ударной закалки и деструкции в местах падения метеоритов. Расширение Земли ведёт к развитию тектонических трещин и дроблению литосферных плит. Прочностные вариации пород благоприятны для избирательной эрозии земной поверхности. Продукты эрозионного разрушения сносятся в Мировой океан, по объёму многократно превышающий все горные породы «над уровнем моря» - с тенденцией к полному вырождению суши. Видимо, для математического описания этого процесса можно применять алгоритм построения топологических групп путём дробно-линейных преобразований сферы Римана.

Введение

Прямое изучение Земли (средний радиус 6371 км) ограничено глубиной Кольской сверхглубокой скважины 12261 м [9], что делает неоднозначными результаты глубинных геофизических исследований. При этом растёт банк данных о строении и природе земной поверхности, развиваются методы комплексных геологических исследований на основе аэрофото- и космоснимков. Современное программное обеспечение и качество ПЭВМ позволяют анализировать гигантские объёмы информации и строить модели, способные заметно повысить результативность поисковых геологических работ. Геология традиционно отстаёт в развитии от прочих естественных наук по ряду специфических причин. Но бытовые различия между полевыми и камеральными условиями работы геологов быстро стираются. Отставание обусловлено применением устаревших представлений (строение Земли, геотектонические гипотезы и др.) при общей слабой информированности геологов о достижениях в области наук о Земле.

Тектонические гипотезы

Научное мнение о строении Земли меняется с накоплением знаний, но удовлетворительной теории её эволюции не создано. Современная научная база геологии – это «конгломерат» из геотектонических гипотез, чья противоречивость вынуждает к поиску компромиссного решения.

Гипотеза базификации («океанизации») земной коры [3] считает основой геотектоники вертикальные движения. До мезозоя преобладали породы кислого и среднего состава – кристаллическая основа современной континентальной коры. В мезозое инъекции мантийных ультраосновных пород

вызвали повышение плотности коры, что привело к опусканию обширных участков суши с образованием океанических впадин. Для «опускания» нет достаточно убедительных доказательств.

Тектоника литосферных плит основана на гипотезе А. Вегенера о дрейфе континентов с постулатом о постоянстве объёма Земли. В тектонике преобладают горизонтальные движения, вызванные ротацией Земли. Разница в скорости движения плит вызывает растяжение (спрединг) и разрыв океанической коры с образованием трансформных разломов и срединно-океанических хребтов (рифтов). В них внедряется мантийный расплав, формирующий «новую» океаническую кору. Прирост коры для соблюдения условия постоянного объёма Земли компенсируют зоны субдукции, где «старая» океаническая кора погружается под континентальную [3], что пока не имеет физического объяснения. После обнаружения мантийных горячих точек - «плюмов», которые отличаются «стационарностью», тектоника литосферных плит («плейт-тектоника») превратилась в «плюм-тектонику» [10]. Плита, «проплывающая» над плюмом, «прожигается» с развитием внутриплитного вулканического очага. Установлена связь плюмов с периодами глобального вулканизма [8].

В космологии Вселенная возникла в результате Большого взрыва нейтронной звезды с инерционным разлётом частиц вещества, увеличением объёма и снижением плотности [24]. Взрыву предшествовало гравитационное стяжение материи с уплотнением до состояния «критической массы». Аналог этой ситуации в механике – упругое «сжатие-расширение» - колебательный процесс, пульсация, чей вселенский масштаб указывает на фундаментальность. Видимо, все объекты во Вселенной подчинены этому ритму.

Частицы обладают массой и взаимно притягиваются, образуя скопления – туманности. Их дальнейшее уплотнение ведёт к нагреванию и появлению звёзд и планет. На поверхности остывающей планеты возникает твёрдая оболочка, чья мощность растёт, вызывая рост внутренних напряжений, приводящий к разрушению и сейсмичности. Она описывается законом Рихтера-Гутенберга, им же описывается динамика амплитуды затухающего колебания. Вращательное движение планет по орбитам – тоже вид колебательного процесса, причём квантованный [17]. Импульсно-колебательный режим типичен для геофизических процессов. Так, гравитационный импульс лунной массы превращает блок земной коры в колебательную систему. Расход импульсной энергии на поддержание колебательного режима ведёт к затуханию колебаний и созданию условий для тектонического расслоения пород [5]. Цикличность геологических процессов – основа геотектонической пульсационной гипотезы [15], на которой построена модель пульсационно-эстафетного формирования плюмов и рудогенерирующих систем [11]. В импульсно-циклическом ритме преобразуется вещество земного ядра с приростом объёма в гипотезе расширяющейся Земли [13].

Геодинамика и геоморфология

Земная литосфера делится на плиты: древние континентальные и молодые океанические. Основой континентальных плит служат кристаллические щиты, в составе которых выделяются древнейшие (AR-PR₁) «ядра» - нуклеары (рис. 1) – побочный продукт «лунной катастрофы» $\approx 4.5 \cdot 10^9$ лет назад [4, 21], в результате чего пра-Земля превратилась в систему Земля-Луна, «двойную планету» с общим барицентром [1].

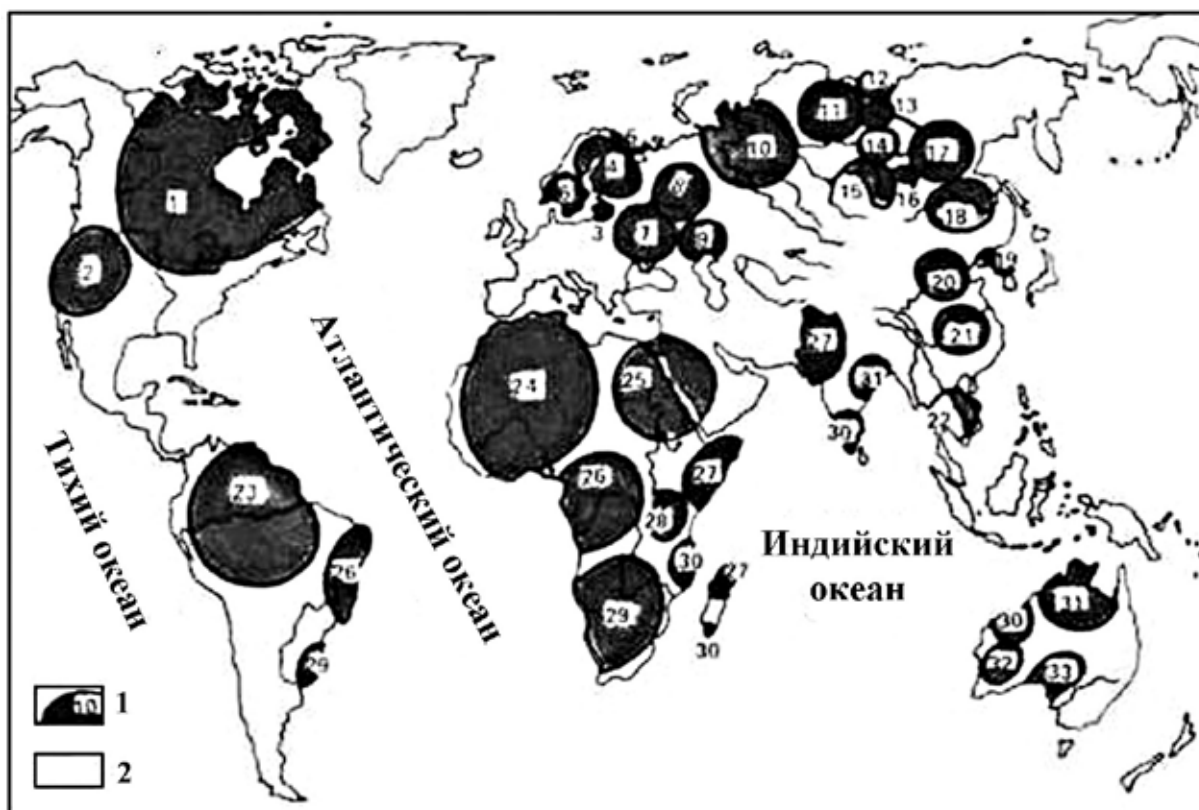


Рис. 1. Распределение нуклеаров (1) в составе континентальных плит (2) на Земле [19].

После «лунной катастрофы» в космосе оказалось много обломков, задержанных тяготением системы Земля-Луна на «временных» орбитах и вернувшихся в серии метеоритных бомбардировок Земли и Луны с последовательным формированием нуклеаров, щитов и первичной земной коры. Окончательная разгрузка «временных орбит» случилась в фанерозое, что вызвало на Земле ряд волн массовой гибели биологических видов [22]. Динамику процесса описывает график затухающего колебания. Интенсивность метеоритных атак со временем снижалась, на что указывает максимальная плотность астроблем на поверхности древних щитов и минимальная – на поверхности океанических плит.

Многие нуклеары (рис. 1) «расколоты» океаническими рифтами: №№ 26 и 29 – Атлантическим, №№ 27, 30 и 31 – Индийским, № 25 – Красноморским, № 4 – Кандалакшским и Онежским грабенами. Первые рифты появились на рубеже AR-PR, когда континентальная земная кора уже сфор-

мировалась и мало отличалась от современной по составу и мощности [13]. Видимо, заложение рифтов вызвано ударами метеоритов. Современные рифты – высшая ступень в глобальной иерархии тектонических трещин, самая долгоживущая из тектонических структур в земной оболочке и наиболее заметная часть рельефа на поверхности Земли.

Расширение Земли вызвало развитие системы трещин в земной (океанической и континентальной) коре, расширение океанических бассейнов, относительное сокращение поверхности суши, дробление на более мелкие фрагменты, их «расползание» и постепенную денудацию поверхности с развитием рельефа. Рельеф – следствие избирательной эрозии пород и прямое отражение их прочности. Прочность породы зависит от совокупного динамического воздействия на неё в период существования. Анализ земной поверхности (аэрофотоснимки, физические карты) выявляет большое разнообразие форм рельефа, основу которого составляет комбинация всего двух геометрических форм: прямолинейной и кольцевой с явным преобладанием последней [6].

Прямолинейные структуры маркируют систему тектонических (меридианных, широтных и др.) трещин эндогенной природы [12]. Кольцевые имеют разное происхождение: карстовые провалы и вулканические кальдеры – эндогенные, ударные кратеры – экзогенные. Но все они – на Земле их более 2000 [16] – сформированы гравитацией. Ударную природу принято подтверждать наличием минералов – стресс-индикаторов (кварц-коэсит и др.), не стабильных вне стрессовых условий и обнаруживающихся не часто (30-40 %). Но поиск стресс-индикаторов не обязателен. Вблизи ударного кратера горная порода благодаря «ударной закалке» обладает повышенной эрозионной стойкостью. По этой причине границы астроблем выделяются в положительных формах рельефа в отличие от «колец» эндогенной природы.

Статистика метеоритных бомбардировок

Почти все найденные на Земле метеориты имеют схожий абсолютный возраст $\approx 4.5 \cdot 10^9$ лет [18], но разное время падения, которое определяет возраст ударного кратера. Возраст и размер кратеров позволяют определить периодичность бомбардировок и общую динамику процесса [23]. Примером разрушительной силы метеоритного удара служит кратер в долине р. Попигай на Сибирской платформе. Его внутренний диаметр $D \approx 75$ км, внешний $D \approx 100$ км, возраст ≈ 30 млн. лет. Попигайский метеорит пробил толщу осадков мощностью ≈ 1.2 км и остановился в породах фундамента с образованием импактных минералов, указывающих на ударное давление $P = 1$ МБар и температуру $T \approx 1000$ °С. Выброшенные взрывом глыбы пород находят в радиусе до 40 км от кратера. При взрыве образовался расплав, сильно превышающий по содержанию SiO_2 (65 %) базальты в составе мишени [23].

Вследствие метеоритной атаки Земли $65 \cdot 10^6$ лет назад (размер выпавших тел 0.1-30 км) возникли кратеры: Гусевский, $D = 3$ км; Каменский,

Украина, 25 км; Усть-Карский, 25 км; Карский, Сев. Приуралье, 65 км; самый большой – Чиксулуб, Мексика, 180 км, 64.98 ± 0.05 млн. лет – «голова» атаки. Это событие вызвало глобальную вулканическую активность, которая продолжалась миллионы лет и уничтожила динозавров [12]. На Земле есть и другие ударные кратеры: Маникуаган, Канада, 100 км, 200 млн. лет; Садбери, там же, 250 км, 1850 млн. лет; Вредефорт, ЮАР, 335 км, 2023 млн. лет [23]. Каждый маркирует метеоритную атаку (рис. 2).

Если размер астроблемы зависит от энергии удара, а отношение параметров «энергия события / возраст» и «энергия события / их число» опи-

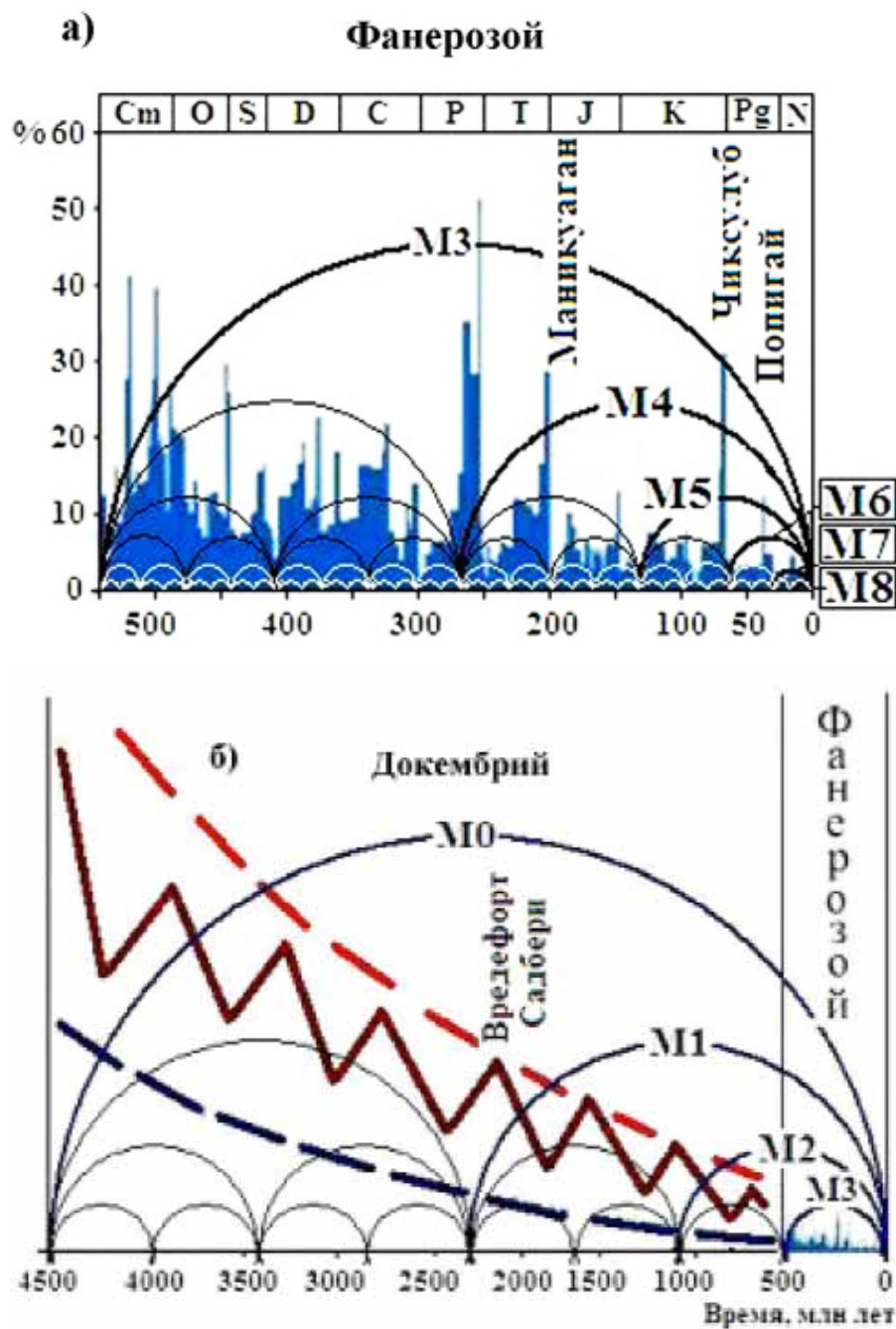


Рис. 2. Динамика геокатастроф: а) массовые вымирания биологических видов в фанерозое; б) весь период с момента «лунной катастрофы»; полукольца ограничивают моды M0 – M8.

сывается графиком затухающего колебания. Метеоритные бомбардировки подчиняются закону Рихтера-Гутенберга, который описывает земную сейсмичность (энергия события / число событий) – тектоническое разрушение горных пород, включая размер обломков и мощность элементов тектонического расслоения земной коры в шаговом ритме затухания звука (стоячей волны) в натянутой струне по закону: $\lambda_n = \lambda/2^n$, λ_n – длина n -й моды, n – номер шага (моды), λ – длина струны (мода № 0). Последовательность длин мод образует геометрическую прогрессию [20].

Механизм затухания стоячей волны использован в «ретропрогнозе» Великого японского землетрясения, где точкой отсчёта послужило предыдущее сильное событие [7]. Глобальная катастрофа – всплеск геодинамической активности (вулканизм, сейсмичность) – начинается с триггера, которым может стать удар крупного метеорита. Если «лунная катастрофа» $4.5 \cdot 10^9$ лет назад – триггер катастрофических метеоритных бомбардировок Земли в AR-PR₁ эпоху [4] с фанерозойским «продолжением» в массовых вымираниях биоты [22] (рис. 2а), можно строить ретроспективную модель периодичности геокатастроф по закону затухания стоячей волны в натянутой струне. Основа расчёта модельных параметров – длина временной «струны»: $M_0 = 4.5 \cdot 10^9$ лет. Результаты расчёта даны в таблице.

Таблица. Временные границы модели катастроф.

№ моды	M0	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9	M10
Длина, млн. лет.	4500	2250	1125	562.5	281.2	140.6	70.3	35.15	16.6	8.79	4.39

Экстремумы (всплески) фанерозойских вымираний совпадают с границами «коротких» мод M6 – M9 (рис. 2а). В модели тектонического расслоения земной коры [5], построенной тем же способом, границы «коротких» мод маркируют динамически активные породные интервалы – концентраторы упругих напряжений. Современные экологические катастрофы с массовой гибелью животных начинаются с постепенного накопления ядовитых отходов производства. Возможно, динамика метеоритных бомбардировок отражает «подготовку» экологических катастроф в прошлом (накопление CO₂ в атмосфере и др. [22]). При геотектонических реконструкциях следует помнить, что расширение Земли сопровождалось снижением силы тяжести. Ускорение свободного падения на поверхности Земли в архее было втрое выше современного [13]. Это отражалось на скорости метеорита в момент падения. Вычисляя энергию удара, нужно делать поправку на возраст события.

Эволюция поверхности расширяющейся Земли

Поверхность материков (особенно древнейшие кристаллические щиты и континентальные плиты) отличается рельефом, сложный «узор» которого образуют прямолинейные и кольцевые линеаменты. Геоморфологическое дешифрирование поверхности Кольского п-ова показало заметное преобладание кольцевых форм [6]. Локализация рудных месторождений в них

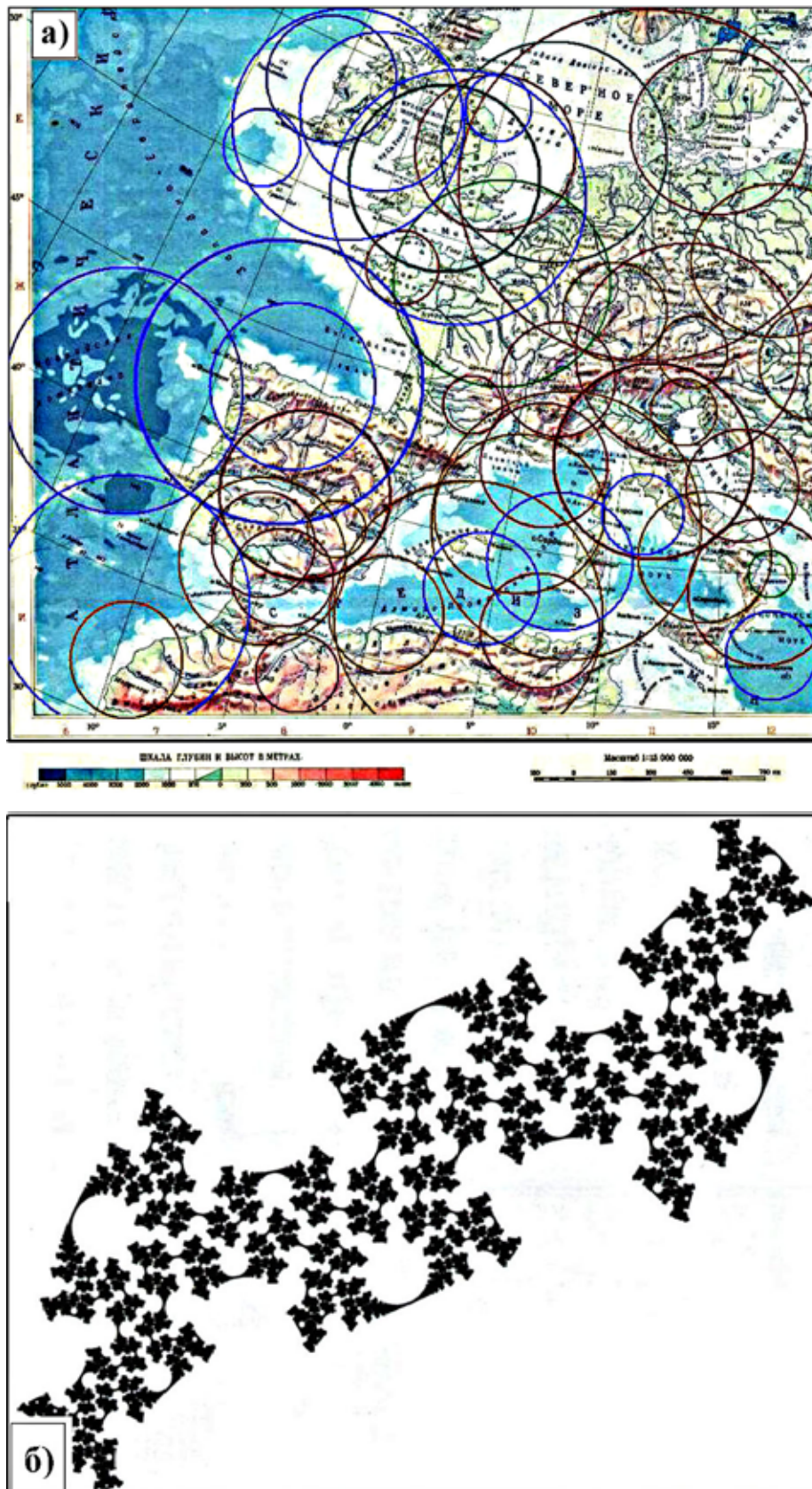


Рис. 3. Комбинации кольцевых структур: а) в результате геоморфологического дешифрирования физической карты Западной Европы [2]; б) в аппроксимации естественной кривой, заполняющей сферу [14].

предполагает связь с метеоритными ударами. Они формируют глубинные разломы до границы с мантией [4, 7] и активизируют тектонический про-

цесс. Анализ земной поверхности (физическая карта) позволяет обнаружить множество объектов с типичными признаками (кольцевая форма, положительный рельеф) импактных структур. На поверхности Зап. Европы без труда выделяются (рис. 3а) десятки фрагментарных кольцевых структур. Фрагментацию создаёт наложение других колец, также проявленных в положительных формах рельефа.

Математика выросла из древней арифметики и геометрии, где простые операции с числами помогали в решении важных проблем. Современная математика имеет ту же цель: арифметика превратилась в алгебру и математический анализ, вместо геометрии для описания поверхности Земли используются топология и теория групп. Сферическая поверхность земного шара отличается рельефом, сложный «узор» которого образован кольцами разного диаметра (рис. 3а). Подавляющее большинство колец – астроблемы, результат метеоритной бомбардировки, которая началась с «лунной катастрофы» и продолжается уже $4.5 \cdot 10^9$ лет. Её динамика описывается графиком затухающего гармонического колебания. Всё это время Земля вращается вокруг своей оси и вокруг Солнца по эллиптической орбите с закономерными циклическими вариациями. Они могли влиять на динамику бомбардировок, но хорошо изучены и поддаются учёту. Все эти закономерности предполагают, что в распределении астроблем на поверхности Земли существует симметрия, которую можно аппроксимировать кривой (рис. 3б) [14]. Помимо кольцевых структур на поверхности, каждая астроблема маркирует «пробой» земной коры – область тотального разрушения пород конической формы. Обычно глубина «пробоя» приближается к радиусу ударного кратера. Это позволяет перейти от реконструкции рельефа к воссозданию физических условий в литосфере [14].

По результатам поверхностной оценки, горные породы на суше имеют объём ≈ 74 млн. км³, вода в Мировом океане ≈ 1350 млн. км³. То есть, океанские впадины превышают по объёму все «сухопутные» горные породы более чем в 18 раз. Эрозия не прекратится, пока для этого есть благоприятные условия. Повышенная прочность пород в границах ударных кратеров приобретает дополнительный смысл. Сухопутная часть земной поверхности стремится к вырождению и когда-нибудь исчезнет под водой. Гипотеза океанизации Земли [3] получает новую жизнь в прогнозе развития земной поверхности. Естественный прирост населения Земли и стремление континентальной и островной поверхности к вырождению предполагают перспективу переселения людей в Океан. Подготовку к этому следует начать с математических моделей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №14-05-00443.

Список литературы

1. Авсюк Ю.Н. Приливные силы и природные процессы. М.: ОИФЗ РАН, 1996. 188 с.
2. Атлас мира. М.: ГУГК СССР, 1988. С. 64.
3. Геологический словарь в 2-х томах. М.: Недра, 1978.

4. Глуховский М.З. Масштабные импактные события архея и палеопротерозоя и их влияние на тектоническую эволюцию ранней Земли в аспекте сравнительной планетологии // Докл. АН. 2014. Т. 456. № 1. С. 64-69.
5. Ильченко В.Л. Приливные волны и динамическая эволюция Земли. Саарбрюккен: LAMBERT Academic Publishing, 2013. 292 с.
6. Ильченко В.Л. Генетическая геоморфология и моделирование рудообразующих систем // Математические исследования в естественных науках. Тр. IX Всерос. научн. школы. Апатиты. Изд-во К & М, 2013. С. 127-131.
7. Ильченко В.Л. Квантово-механические эффекты в геодинамике // Математические исследования в естественных науках. Тр. IX Всерос. научн. школы. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 131-134.
8. Кирдяшкин А.А., Кирдяшкин А.В. Взаимодействие термохимического плюма с мантийными свободно-конвективными течениями и его влияние на плавление и перекристаллизацию мантии // Геология и геофизика. 2013. Т. 54. № 5. С. 707-721.
9. Кольская сверхглубокая. Научные результаты и опыт исследования. М.: Технонефтегаз. 1998. 260 с.
10. Кузьмин М.И. К новой парадигме геологии // Природа. 2014. № 7. С. 49-58.
11. Коробейников А.Ф., Ананьев Ю.С., Гусев А.И. Мантийно-коровые рудообразующие системы, концентрирующие благородные металлы. Томск: Изд-во ТПУ, 2012. 262 с.
12. Короновский Н.В., Брянцева Г.В., Гончаров М.А. и др. Линеаменты, планетарная трещиноватость и регматическая сеть: суть явлений и терминология // Геотектоника. 2014. № 10. С. 75-88.
13. Ларин В.Н. Наша Земля: происхождение, состав, строение и развитие изначально гидридной Земли. М.: Агар, 2005. 242 с.
14. Мамфорд Д., Райт Д., Сирус К. Ожерелье Индры. Видение Феликса Клейна. М.: Изд-во МЦМНО, 2011. 416 с.
15. Мартыянов Н.Е. Размышления о пульсациях Земли. Красноярск: КНИИ-ГиМС, 2002. 272 с.
16. Михеева А.В., Хазанович-Вульф К.К. Следы гравитационного воздействия крупных болидов // Геоинформатика. 2014. № 1. С. 30-41.
17. Окунь Л.Б. Азы физики. Очень краткий путеводитель. М.: ИТЭФ, 2012. 138 с.
18. Перельман А.И. Геохимия. М.: Высшая школа, 1989. 528 с.
19. Планета Земля. Энциклопедический справочник. СПб.: Изд-во ВСЕГЕИ, 2004. 652 с.
20. Пономарёв Л.И. Под знаком кванта. М.: Наука, 1989. 368 с.
21. Хаин В.Е., Короновский Н.В. Планета Земля от ядра до ионосферы. М.: КДУ, 2007. 244 с.
22. Шувалов В.В., Артемьева Н.А., Кузьмичёва М.Ю. и др. Выбросы из кратеров – маркеры ударных катастроф // Физика Земли. 2012. № 3. С. 66-80.
23. <http://www.bugaga.ru/interesting/1146738789-top-10-samye-moschnye-padeniya-meteoritov-v-istorii.html#ixzz2r24DFrhk>.
24. <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%91%D0%BE%D0%BB%D1%8>.

«МЯГКАЯ» СИСТЕМА КООРДИНАТ В ПРАВИЛЬНЫХ СИМПЛЕКСАХ

Петров Т.Г.

Санкт-Петербургский госуниверситет, г. Санкт-Петербург,
tomas_petrov@rambler.ru

В статье описан метод RHAT как система координат областей в правильном симплексе. R – упорядоченная последовательность компонентов – имена секторов; H – энтропия Шеннона; A – анэнтропия; T – толерантность. Способ упорядочения координат даёт алфавитную иерархическую систему составов. Диаграммы HA или HT предназначены для отображения случайных и упорядоченных совокупностей составов.

Введение

Предпосылки возникновения метода касаются поликомпонентности объектов (ценозов, сообществ, смесей), неопределённости границ между ними, неполноты сведений о них, трудностей классифицирования объектов, неопределённости их имён, трудностей выявления направления эволюции составов при разнонаправленности изменений отдельных компонентов. Для снижения сложности подобных проблем предложен информационный язык (рангово-энтропийный метод) отображения составов – RHAT. Здесь R – последовательность символов компонентов состава по снижению их содержаний; H – информационная энтропия Шеннона как энтропия смешения; A – анэнтропия как энтропия разделения; T – толерантность как энтропия очистки. Способ описан многократно [6-17, 22, 23] и далее изложен кратко. Метод был предложен для свёртки химических составов горных пород и минералов, но в дальнейшем его полезность была показана при решении задач в различных областях знаний [3, 18-20].

Обычно метод излагался в понятиях алгебры и теории информации. Здесь мы представим его как способ описания – координирования – кодирования области в пространстве, ограниченном правильным симплексом. Из всех симплексов треугольник давно является священной коровой минералогов, петрографов и других геологов, ставший тупиком в представлении многокомпонентных систем. Требование наглядности не позволяет выйти в объём, даже изображение тетраэдра проблематично. Отображение 5-10-50-компонентного состава без радикальной свёртки анализа невозможно. В то же время химические анализы с 50 элементами обычны. С другой стороны, химических, минеральных, биовидовых, возрастных, лингвистических «анализов» у естественников и гуманитариев накопилось тысячи. Есть проблема привести их в порядок, выявить дубли, брак, увидеть материалы в целом, а не отдельные его компоненты или отношения, увидеть соотношения между составами, сгущения и разряжения, выявить направленность

эволюции составов. На этом фоне нужно обнаружить закономерность или запрет на сформированную гипотезу. Это стоит трудов, затраченных на разработку метода, и труда на ознакомление с ним. Под мягкой (soft) системой координат далее будем понимать положение области, её форму и размеры, а не точки, как в жесткой (hard) системе. Цель статьи – обратить внимание на метод описания и систематизации составов RHAT, а также на задачи, решаемые с использованием информационной энтропии К. Шеннона.

Координаты RHAT

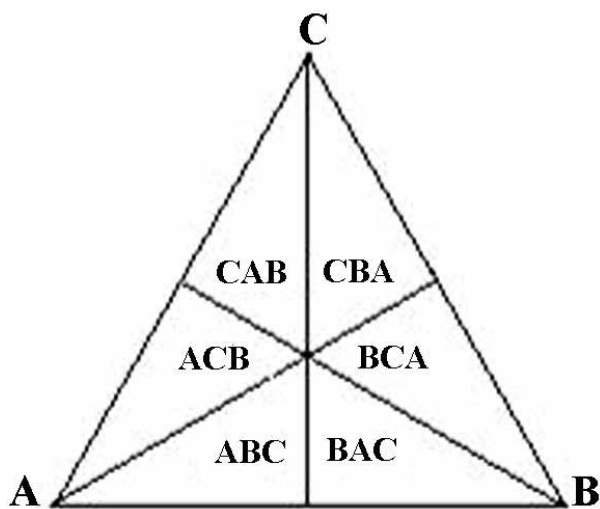


Рис. 1. Имена секторов в симплексе.

Первая координата – ранговая формула R (рейтинг) – последовательность символов (имён) n компонентов, упорядоченная по снижению их содержаний p , при $\sum p_i = 1$. Такой ряд (например, кварц – полевой шпат – слюда – для ведущих минералов гранита) является именем сектора в симплексе с тремя вершинами (рис. 1). Для 4-компонентного состава нужен тетраэдр, а далее – непредставимый симплекс. В вершинах симплекса одно из значений $p = 1$, здесь находятся чистые компоненты (отсутствующие в природе). В его центре $p_1 = p_2 = p_3 = \dots = p_n = 1/n$.

В симплексе с n вершинами число секторов $K = n!$. Пример их именования дан на рис. 1. Содержания первого компонента находятся в интервале $1/n \div 1$, в остальных рангах $0 \div 1/n$.

Вторая координата – информационная энтропия Шеннона – с точностью до константы является аналогом термодинамической энтропии смешения [5] и мерой сложности состава системы. Расчёт по формуле $H = -\sum p_i \ln p_i$. Для приведения к интервалу $0 \div 1$ используем $E_n = H / \ln n$. Максимальное значение вклада одного компонента в энтропию – $p_i \ln p_i$ для логарифмов при любом основании реализуется при $p = 0.368\dots$ В треугольнике изолинии нормированной энтропии даны на рис. 2. Её можно считать обобщённым расстоянием от центра до вершин симплекса.

Третья координата – анэнтропия – мера малости малых компонентов, рассчитывается по формуле: $A = -1/n \sum \ln p_i - \ln n$. Согласно ей, A принимает значение в интервале $(0, +\infty)$. Для приведения к интервалу $0 \div 1$, что удобно в сочетании с приведённой энтропией, A делится на анэнтропию «идеально чистой» системы. За максимально чистый состав принимается: $p_1 = 1 - (n-1)*\delta$, $p_2 = p_3 = \dots = p_n = \delta$, где δ – содержания, равные половине чувствительности метода анализа. Это ухищрение диктуется «принципом всюдности» [1], согласно которому в любом макрообъекте есть все элементы периодиче-

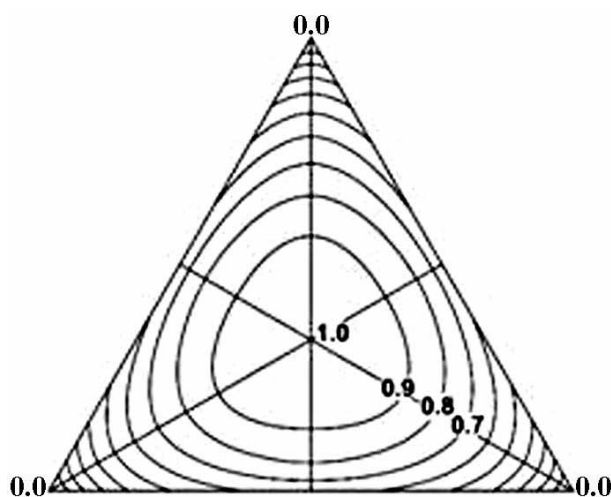


Рис. 2. Изолинии энтропии, нормированной к интервалу $0 \div 1$.

степени, чем изолинии анэнтропии. Эта характеристика в наибольшей степени применима для оценки близости состава к вершине симплекса, то есть к идеально чистому составу. С позиций теории информации толерантность – это среднее время ожидания сигнала при их равномерном поступлении. Вклады трёх координат состава даны на рис. 4.

Вклады в А и Т функционально зависят от вклада в энтропию. Если принять вклад в энтропию ($-p \ln p$) за первообразную функцию, то её первая производная минус 1 будет вкладом в анэнтропию ($-\ln p$), вклад в толерантность – второй производной по вкладу в энтропию и первой – по вкладу в анэнтропию ($1/p$). Тем самым, анэнтропия и толерантность являются естественными этапами идеологии, заложенной в информационной энтропии Шеннона, с переходом от одномерного представления данных к диаграммному. Метод может рассматриваться как способ кодирования и «мягкая» система координат в правильных симплексах, понимая под «мягкостью» отсутствие точного решения обратной задачи при числе переменных, превышающих число уравнений. Так, 40-элементный анализ состава содержит 40 неизвестных, свёрнутых в 4 уравнения: H , A , T и $\sum p_i = 1$.

Упорядочение составов

Координаты составов RHAT (с описаниями конкретных объектов) записываются в строку и располагаются в колонку (табл. 1). Для этого последо-

ской системы. Анэнтропию можно считать энтропией разделения, так как многие наблюдения за траекториями процессов показывают её возрастание. Изолинии анэнтропии в треугольнике даны на рис. 3. Её можно считать обобщённым расстоянием от центра до вершин симплекса.

Четвертая координата – толерантность, рассчитываемая по формуле $T = \ln [1/n \sum (1/p_i)] - \ln n$. Изолинии нормированной толерантности не приводим, так как они прижаты к вершинам симплекса в большей

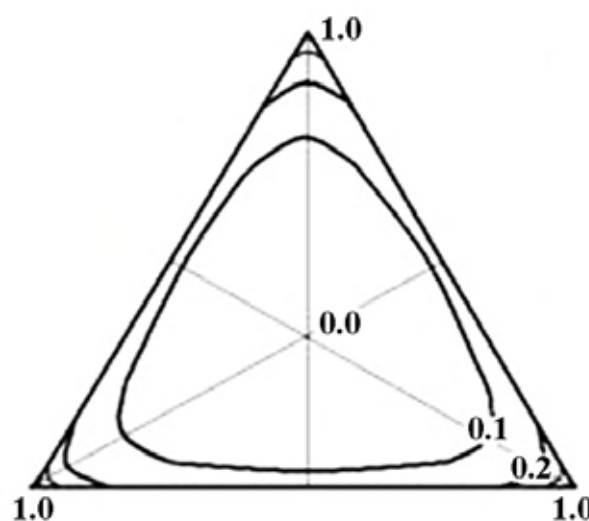


Рис. 3. Изолинии анэнтропии, нормированной к интервалу $0 \div 1$.

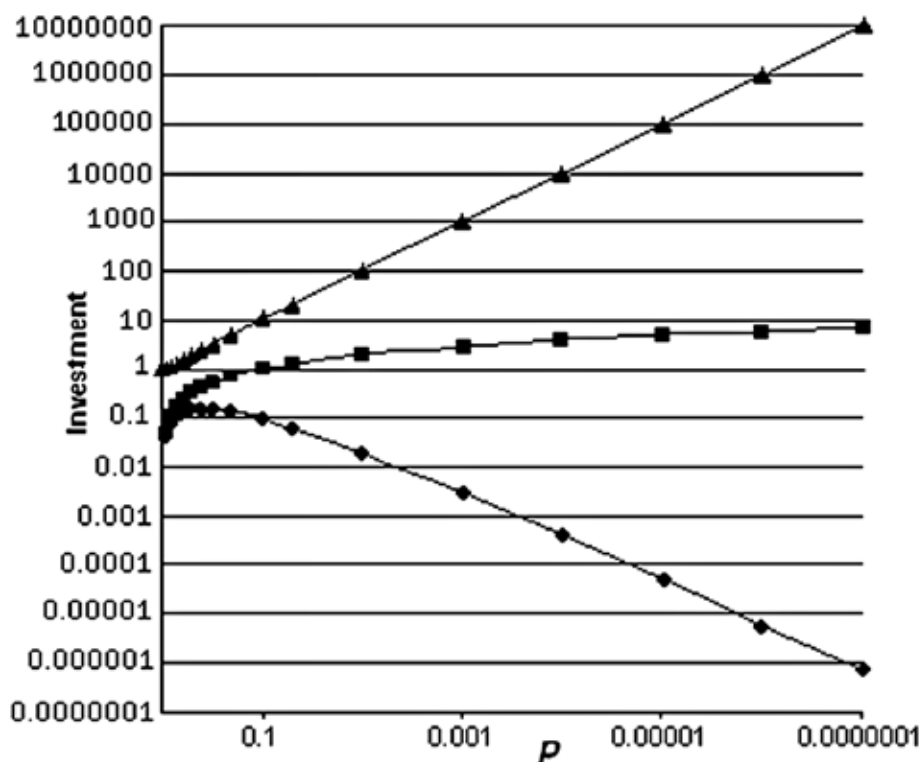


Рис. 4. Вклады в энтропию ◆, анэнтропию ■, толерантность ▲.

вательность координат RHAT принимается за слово, в котором использованы три алфавита. Один буквенный – для ранговых формул, играющих роль «корней» – смысловой нагрузки слова, и два числовых: для энтропии («суффикса») – по снижению значений H , для A и T – по возрастанию («окончаний»). Упорядочение производится по лингвистическому принципу. Сначала упорядочиваются корни, затем суффиксы, далее – окончания.

В качестве символов в ранговой формуле R желательно использовать какие-либо «интенциональные» алфавиты, в которых есть смысловые связи между соседними символами (сущностями), в отличие от «естественных» алфавитов, где таковая отсутствует или слаба. В словарях, использующих «естественные» алфавиты, рядом стоят слова, сходные по начертанию, редко – по смыслу. При использовании алфавита для кодирования химических составов – Периодической системы элементов – в группах ранговых формул $OSiAlH \dots OSiAlNa \dots OSiAlK$ находятся родственные объекты. Они имеют общее название «алюмосиликаты», некоторые даны в табл.1. При увеличении ранговой формулы растёт определённости выделения части пространства, к которой принадлежит состав, и наоборот, степень обобщения при её сокращении.

При равенстве R упорядочение составов производится по снижению H – преимущественному изменению энтропии при разделении [21]. Под разделением понимается образование двух и более систем, различающихся по составу, из одной. Под смешением – формирование одной относительно однородной системы из двух различающихся по составу. При равенстве H упорядочение координатных строк производится по обычно противоположному направлению изменений A и T – их возрастанию.

Таблица 1. Выборка из базы данных «Химические составы природных объектов» [11].

Ранговая формула										En	An	Объект
H	He	O	C	Ne	N	Mg=	Si=	Fe	S	0.135	0.837	Солнце
H	O	C	N	Ca=	P	K=	S	Na	Cl	0.428	0.434	Тело человека
H	O	N	Cl	Si	Li	B =	S	C	Ca	0.278	0.980	Вода, гейзер, Камчатка
O	C	Ca	Mg	Fe	Si	P	Al	Mn	K	0.561	0.210	Карбонатит, Салланлатва
O	Mg	Si	Fe	Al	Ca	Na	K =	Cr	Ti	0.542	0.301	Марс
O	Mg	Si	Fe	Al	Ca	Na	Cr	K	Ti	0.511	0.305	Мантия + кора, Земля
O	Si	H	Al	C=	Ca=	Mg=	Fe=	K	Na	0.578	0.166	Глина четвертичная
O	Si	H=	Al	Fe	K	Mg	C=	Ca	Ti	0.361	0.401	Песчаники, Казахстан
O	Si	Na	Mg	Al=	Ca	Fe	Mn	W	Ti	0.286	0.804	Кварц, Забайкалье
O	Si	Mg	Al	Ca=	Fe	Cr	Ti	Mn	Na	0.554	0.274	Пироп, Урал
O	Si	Mg	Fe	Al	Ca	Na	Mn	S	K	0.567	0.193	Метеорит, Жмеринка
O	Si	Al	Na	K	H	Fe	Ca	Mg	Ti	0.488	0.247	Гранит, среднее из 2485 ан.
O	Si	Al	Ca=	Fe	Mg	Ti	Na	K	Mn	0.552	0.236	Базальт, Луна
O	Si=	Ca	C	H=	Fe	P	F=	K	Al	0.617	0.138	Карбонатит, Малави
O	Ca=	C	Fe	Mg	P	Si	Al	Sr	Na	0.519	0.278	Карбонатит, Ковдор
O	Ca	Fe	P	Mg	Si	Al	Na	Mn	Ti	0.569	0.268	Фоскорит, Ковдор
F	Ca	Ba=	Ti	Zr	O	Be=	Al	Bi	Mn	0.281	0.962	Флюорит, Забайкалье
S	Fe	As	Sb	Zn	Pb	Co=	Ni	Bi	Se	0.282	0.967	Пирит, Сибай
Cu	Sn	As	Fe	Sb	Pb	Ni=	Ag	Bi=	Co	0.069	0.526	Бронза, нож, Алексеевка

В результате такого упорядочения возникает линейная иерархическая периодическая система составов, в частности, химических. В табл. 1 дана выборка кодов-координат из базы данных химических составов, содержащей около 80 000 записей. Горизонтальные линии – разделители выявляют иерархическую структуру системы. Знаки равенства означают $p_n / p_{n+1} \leq 1.15$, то есть близость содержаний соседних компонентов в ранговой формуле.

Такая система, обладает следующими свойствами. Универсальность – не существует химического состава, который было бы нельзя представить в виде RHAT. *Линейность* – система не имеет ветвлений. *Алгоритмичность* – система строится по простому правилу. *Открытость* – система допускает расширение списка компонентов. *Устойчивость* – система допускает изъятие и включение новых ранговых формул без изменения порядка остальных. *Исчислимость* – максимальное число ранговых формул U может быть опре-

делено как число перестановок без повторений из N возможных компонентов данного алфавита по n (длина формулы): $U = N! / (N-n)!$ *Полнота* – для определенной длины алфавита и определённой длины ранговой формулы нет других формул сверх определённых выше. Для данных N и n последовательность представляет собой универсум существующих, возможных и невозможных составов данной области знания. *Иерархичность* – упорядочение сначала происходит по высшему рангу (первой букве), затем по второму рангу (второй букве) и т.д. Ранговая формула одновременно является упорядоченным перечнем всех более старших таксонов. *Периодичность* – ранговые формулы близких по составу объектов располагаются группами. В системе проявляется связь с порядком изменения свойств объектов исходного алфавита (здесь – Периодической системы элементов). Для химических составов от начала классификации к концу статистически нарастают средние атомные массы объектов, их плотности, и статистически снижается встречаемость в природе.

Диаграммы НА и НТ

Значения числовых координат H , A , T зависят от числа компонентов. Поэтому сравнение полных анализов затруднено или невозможно, что проявилось на диаграмме НА возрастных распределений населения стран [22]. Для сопоставимости данных выполняется стандартизация R и, после приведения сумм усечённых анализов к 1, расчёт $НАТ$. Для учёта более полной информации стандарт следует приближать к длине самого короткого анализа в выборке. При этом, чем короче анализ, тем больше шансов на потерю не определявшихся компонентов и включение в расчёт меньших значений, чем были бы при более полном анализе, и тем выше энтропия.

Поле допустимых значений $EnAn$ для 10-компонентной системы показано на рис. 5. Верхняя граница получена в результате смешения составов [10].

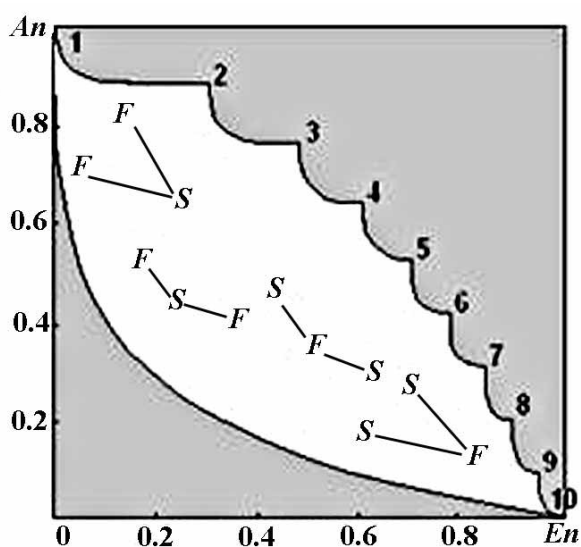


Рис. 5. Границы поля $EnAn$ и типичные направления эволюции составов при разделении и смешении.

Цифры около точек вдоль верхней кривой соответствуют числу компонентов с равными содержаниями при том, что остальные имели содержания половин чувствительности метода анализа, принятых за 0.00005. Эта величина примерно соответствует чувствительности «мокрых» анализов, не потерявших ценности с появлением новых технологий. Нижняя кривая отвечает условию: $p_1 = 1 - (p_2 + p_3 + \dots + p_{10})$, при этом: $p_2 = p_3 = p_4 + \dots + p_{10}$.

На рис. 5 показаны типичные изменения составов при разделении (две фигуры S-F слева) и смешении (две фигуры справа). Это выявлено

при прослеживании десятков реальных изменений составов горных пород и минералов. Процессы интеграции и дифференциации, как более общие по сравнению со смешением и разделением, были выделены Г. Спенсером для всей природы. На диаграмме S обозначают точки исходных составов (Start), F (Final) – конечные составы. Соотношения направлений при смешении и разделении иллюстрируют теоремы о преимущественных направлениях изменения энтропии в этих процессах [21].

Процессы разделения и смешения, отображаемые в симплексах, «тянут» точки составов к вершинам: к одной, если в составе преобладает один компонент (самородный элемент, близкое к монопациональному сообщество); к двум, если остальные компоненты теряют значимость, подавляются (очистка каменной соли, воды); к трём, если очищается трёхэлементное соединение (ректификация спирта), и т.д. Обратные движения – к центру симплекса – следствия смешения. Ни в центре, ни в вершинах симплекса не существуют реальные (по крайней мере, химические) составы, так как для достижения этих точек нужно иметь идеально чистые вещества. Всё происходит между двумя крайностями. Например, становление гранита – разделение, затем гидратация некоторых минералов – смешение, затем дезинтеграция породы с выносом подвижных растворов и глин – разделение, попадание продуктов разрушения гранита в ручьи, почву – смешение и т.д. Для каждого сохраняющегося элемента первичной системы – вечная смена процессов смешения и разделения. В биоценозах на эти процессы накладываются рождение и гибель организмов, но возвратно-поступательное движение точки, отмечающее на диаграмме НА сезонные циклы, будет происходить монотонно до тех пор, пока экосистема не начнёт разрушаться. Описание диаграммы и модель разделения-смешения даны в [10, 12, 15, 22].

Обсуждение

Метод RHAT – универсальный метод описания составов, наряду с методами главных компонент и кластерным анализом может войти в обобщающую дисциплину «Составистика», позволяющую работать с содержаниями, интенсивностями, весами, значимостями составных частей любых сложных систем. Разработка метода происходила в направлении проверки содержательности результатов в различных областях знаний. В то же время, его математическая сторона разработана недостаточно. Выполненные автором пересчёты анализов из [4] показали, что разброс данных $EnAn$ в средней части диаграммы составляет ± 0.005 по обеим осям. В связи с этим встаёт вопрос, каковы минимальные и максимальные значения r для каждого ранга системы при данных $En \pm 0.005$ и $An \pm 0.005$. Иными словами, каковы формы «тел содержаний R_i » в проекциях на поле $EnAn$ и НТ при возможном разбросе данных ± 0.005 ?

Другой вопрос, важный в практике исследования эволюции составов. Известно, что все смешения составов дают дуги, выпуклые вниз вправо. В [2] описано формирование пегматитов в два этапа: первый – магматический с трендом разделения (снижение H , рост A), второй – с трендом сме-

шения. Нужно установить, возможна ли такая смена направлений в результате однонаправленного процесса, говоря иначе – доказать, что траектории монотонных процессов не могут иметь минимума энтропии и максимума анэнтропии. Если такая смена обнаружится на кривой НА, можно говорить о немонотонности процесса.

Предложенный в 1971 г. метод не был востребован в геологии, чему способствовало несколько причин: а) непривычные единицы измерения для химических составов, принятые автором для универсальности подхода – атомные доли вместо оставшихся из XIX в. оксидов типа SiO_2 , Al_2O_3 , FeO ..., б) интегральность подхода к сложным составам при господствующем на диаграммах учёте 2-3 главных компонент, в) не раз упоминавшаяся логарифмика, г) недоверие к кристаллографу, посягнувшему на решение проблем, представлявшихся в 1970-х неразрешимыми: упорядочить все химические и минеральные составы, положить на одну диаграмму горные породы, руды, воды, газы, метеориты... С решением проблемы кодирования формул минералов в сочетании с R-словарём-каталогом химических составов минералов [13] открыта возможность создания единой структурно-химической классификации реальных минералов, а также возможность отображать и изучать эволюцию минерального мира на диаграммах, а не одномерных последовательностях информационной энтропии.

Работа обеспечивается оригинальным программным комплексом Petros3, обеспечивающим работу по 100 алфавитам, формирование баз данных, в том числе библиографической, расчёты расстояний нескольких видов, коэффициентов корреляции, свёрток больших объёмов информации в виде обобщённых ранговых формул и многое другое [14]. Автор будет считать свою задачу выполненной, если заинтересует темой хотя бы одного математика.

Благодарности

Автор благодарен Н.И. Красновой за распространение метода, С.В. Мошкину за составление программы Petros3, Ю.Л. Войтеховскому и В.В. Гордиенко за понимание и публичные оценки метода, С.В. Чебанову за укрепление его методологического фундамента, А.А. Андриянец-Буйко, А.Г. Булаху, В.А. Глебовицкому, В.Я. Васильеву, В.Н. Дечу, И.С. Седовой, П.Б. Соколову, О.И. Фарафоновой, В.В. Хаустову и А.В. Шуйскому, помогавшим автору, а также оппонентам, побуждавшим его к более тщательному описанию метода.

Список литературы

1. Вернадский В.И. О рассеянии химических элементов // Избр. соч. Т.1. М.: Изд-во АН СССР, 1954. С. 517-527.
2. Гордиенко В.В., Петров Т.Г. Исследование редкометалльных пегматитов с использованием языка RHA // Зап. ВМО. 1981. № 5. С. 546-558.
3. Крамаренко С.С. Особенности использования энтропийно-информационного анализа для количественных признаков биологических объектов // Изв. Самарского НЦ РАН. 2005.
4. Кухаренко А.А., Ильинский Г.А., Иванова Т.Н. и др. Кларки Хибинского щелочного массива // Зап. ВМО. 1968. № 2. С. 133-149.

5. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия. М.: Ин. лит-ра, 1962. 1148 с.
6. Петров Т.Г. Обоснование варианта общей классификации геохимических систем // Вестник ЛГУ. 1971. № 18. С. 30-38.
7. Петров Т.Г. Опыт общей классификации петрохимических систем // Проблемы геологии. Тр. ЛОЕ. Т.74. Вып. 2. Л.: Изд-во ЛГУ, 1974. С. 84-97.
8. Петров Т.Г. Проблема разделения и смешения в неорганических системах // Геология. Т. 2. М.: Изд-во МГУ, 1995. С. 181-186.
9. Петров Т.Г. Язык-метод RHA для описания, систематизации и изучения изменения составов любой природы // Ценологические исследования. Вып. 1. Математическое описание ценозов и законы технетики. Абакан: ЦСИ, 1996. С. 256-273.
10. Петров Т.Г. Информационный язык для описания составов многокомпонентных объектов // Научно-техническая информация. 2001. № 3. С. 8-18.
11. Петров Т.Г. Иерархическая периодическая система химических составов и её связь с периодической системой элементов // Вестник СПбГУ. Сер. 7. 2009. № 2. С. 21-28.
12. Петров Т.Г. Графическое отображение эволюции составов поликомпонентных объектов любой природы // Научно-техническая информация. 2012. № 3. С. 21-31.
13. Петров Т.Г., Краснова Н.И. R-словарь-каталог химических составов минералов. СПб.: Наука, 2010. 150 с.
14. Петров Т.Г., Мошкин С.В. Метод RHA и его реализация в программном комплексе Petros-3 // Вычисления в геологии. 2011. № 1. С. 50-53.
15. Петров Т.Г., Фарафонова О.И. Информационно-компонентный анализ. Метод RHA. СПб., 2005. 168 с.
16. Петров Т.Г., Фарафонова О.И., Соколов П.Б. Информационно-энтропийные характеристики состава минералов и горных пород как отражение напряжённости процесса кристаллизации // Зап. ВМО. 2003. № 2. С. 33-40.
17. Руденко Ю.Л., Петров Т.Г., Мошкин С.В. «Сложность» и «чистота» химического состава как проявление процессов разделения при формировании турбидитов в различных геодинамических обстановках на примере современных отложений // Вестник СПбГУ. Сер.7. 2005. № 1. С. 24-34.
18. Чебанов С.В. Логические основания лингвистической типологии. Вильнюс: VIANI, 1996. 92 с.
19. Чебанов С.В. Динамика культурных форм // Фундаментальные проблемы культурологии. Т. 3. Культурная динамика. СПб.: Алетейя, 2008. С. 184-197.
20. Чебанов С.В., Петров Т.Г. Интенциональность, интенциональные алфавиты, интенциональные слова и словари // Актуальные проблемы современной когнитивной науки. Иваново, 2013. С. 239-266.
21. Шурубор Ю.В. Об одном свойстве меры сложности геохимических систем // Докл. АН СССР. 1972. Т. 205. № 2. С.453-456.
22. Petrov T.G. Separation-mixing as a model of composition evolution of any nature // J. Systemics, Cybernetics and Informatics. 2014. V. 12. N 1. P. 76-81.
23. Petrov T.G., Moshkin S.V. RHA(T)-system for coding of discrete distributions and their alteration processes. Proc. 3rd Int. multi-conference on complexity, informatics and cybernetics. 2012. P. 12-16.

ЗОНА ПРОТЕКАНИЯ ГЕТЕРОФАЗНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Пушкин А.А., Леонтьев М.А., Римкевич В.С.

Институт геологии и природопользования ДВО РАН, г. Благовещенск

В статье описана программа на основе Microsoft Access 2007 с использованием процедур vba для расчётов термодинамики химических реакций *a priori* и кинетических характеристик гомо- и гетерофазных реакций *a posteriori*. Основная цель работы – вопрос о механизме гетерофазных химических реакций между веществами в твёрдых фазах. Найден критерий протекания твёрдофазных реакций в переходной зоне. С использованием погрешностей вычисления констант скорости реакции определена зависимость концентрации продуктов от времени.

Гетерофазными называются реакции, протекающие между веществами в различных фазах [1]. Примером таковой может быть твёрдофазная реакция между веществами, находящимися, например, в порошках. Гетерофазная реакция включает диффузионную и кинетическую стадии. Первая – диффузия молекул одного вещества внутрь другого на фронте реакции. Вторая – химическое взаимодействие молекул при столкновении. Сопротивление гетерофазной химической реакции складывается из сопротивлений обеих стадий. Сопротивлением реакции называется величина, обратная её скорости. Сопротивлением кинетической стадии для реакции 1-го порядка является величина, обратная её скорости – $1/kC_A C_B$, для диффузионной стадии – величина, пропорциональная величине, обратной коэффициенту диффузии $1/(A \cdot D)$, где k и D – константа скорости и коэффициент диффузии, A – коэффициент, зависящий от удельной поверхности раздела фаз и толщины зоны контакта [2]. Справедливо соотношение

$$\frac{1}{k_{эфф}} = \frac{1}{kC_A C_B} + \frac{1}{A \cdot D} \quad 1$$

Скорость реакции определяется наиболее медленной стадией, время протекания реакции приблизительно равно времени, затраченному на эту стадию. О реакциях, для которых более медленной является стадия диффузии, говорят, что они проходят в диффузионной области. О реакциях, в которых более медленной является стадия химического взаимодействия молекул, говорят, что они протекают в кинетической области. Если времена протекания обеих стадий приблизительно равны, говорят, что реакция протекает в переходной области.

Выведем уравнение, выражающее условие протекания в переходной области гетерофазной химической реакции вида $A + B \rightarrow \text{продукты}$. Если реагирующие вещества представляют собой порошки, то после их переме-

шивания реакция будет проходить в точках контакта зёрен веществ А и В. Точечный контакт в реальных условиях превращается в площадку. Согласно закону Фика, через границу зёрен будет идти диффузия веществ, пусть из А в В, со скоростью $D (\partial C_A / \partial x) S$, где D – коэффициент диффузии, S – контактная площадка, $(\partial C_A / \partial x)$ – градиент концентрации вещества А. В зерне вещества В будет идти реакция со скоростью $k C_A C_B V$, где k – константа скорости реакции А и В, $C_A C_B$ – произведение концентраций А и В, V – объём зерна В. Из равенства скоростей диффузии и химической реакции между А и В в переходной области, получим:

$$D \frac{\partial C_A}{\partial x} S \sim k C_A C_B \cdot V. \quad 2$$

Полагая, что на одной границе переходного слоя концентрация вещества А равна C_A , а на второй 0, представим градиент концентрации в (2) в виде отношения концентрации вещества А к толщине пограничного слоя.

$$D \frac{C_A}{\delta} S \sim k C_A C_B \cdot V$$

Обе части формулы сократим на C_A , представим коэффициент диффузии и константу скорости в виде зависимостей Аррениуса:

$$D_0 \exp\left(-\frac{E_D}{RT}\right) \cdot \frac{S}{\delta} \sim k_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \cdot C_B \cdot V$$

Вводя обозначения $\beta_0 = D_0 / \delta$ – коэффициент массоотдачи фазы А, $f = S/V$ – удельная поверхность контакта фаз, D_0 и k_0 – предэкспоненциальные члены в зависимостях Аррениуса для коэффициента диффузии и константы скорости, E_A и E_D – энергии активации химической реакции и диффузии, получим

$$\beta_0 \cdot f \sim k_0 C_B \cdot \exp\left(-\frac{E_A - E_D}{RT}\right) \quad 3$$

Уравнение (3) является критерием протекания твёрдофазной реакции в переходной области аналогично критерию для реакции между двумя жидкими фазами [2]. Основное отличие – наличие экспоненциального члена, в который вынесена зависимость коэффициентов диффузии и константы скорости от температуры, а также от разности между энергиями активации диффузии и химической реакции. Так, знак выражения под экспонентой зависит от соотношения энергий активации этих процессов. Если энергия активации химической реакции E_A больше энергии активации диффузии E_D , то при низких температурах определяющим фактором будет диффузия, а при высоких – химическое взаимодействие молекул. Если энергия активации химической реакции E_A меньше энергии активации диффузии E_D , то зависимость от температуры будет носить противоположный характер. Таким

образом, экспоненциальный член определяет температурную зависимость гетерофазной реакции. Но её ход зависит и от факторов, которые не меняются с температурой, в частности, от предэкспоненциальных множителей в зависимости Аррениуса для коэффициентов диффузии D_0 и константы скорости k_0 , а также от удельной поверхности контакта двух фаз f , которая, в свою очередь, зависит от дисперсности. Измельчение частиц способствует смещению равновесия в кинетическую зону реакции.

При вычислении констант скоростей исходные данные линеаризовывались логарифмическим и двойным логарифмическим методами. Далее методом наименьших квадратов вычислялись коэффициенты линейной регрессии. Для вычисления констант скоростей использовались угловой коэффициент и свободный член уравнения. Погрешность вычисления константы скорости говорит о точности, с которой линеаризованная последовательность экспериментальных точек следует линейной регрессии, и о том, насколько точно экспериментальная кривая подчиняется степенной зависимости или уравнению Авраами. Чем больше погрешность вычисления констант скоростей (4, 5), тем больше отклонение экспериментальной кривой от соответствующей зависимости. Следование экспериментальной кривой тому или иному закону позволяет судить об определяющем вкладе в ход реакции столкновений или диффузии. Для степенного закона погрешности, согласно [3], определяются формулой:

$$\frac{dk}{k} = \ln \alpha_{max} \cdot k_p \cdot \frac{\sigma_y}{\sigma_x}, \quad 4$$

где $\ln \alpha_{max}$ – логарифм максимальной степени превращения продукта реакции, k_p – коэффициент Стьюдента, σ_y – среднеквадратическое отклонение логарифма экспериментальных степеней превращения от среднего, σ_x – среднеквадратическое отклонение логарифмов отсчётов времени от среднего. Для уравнения Авраами из [3] следует:

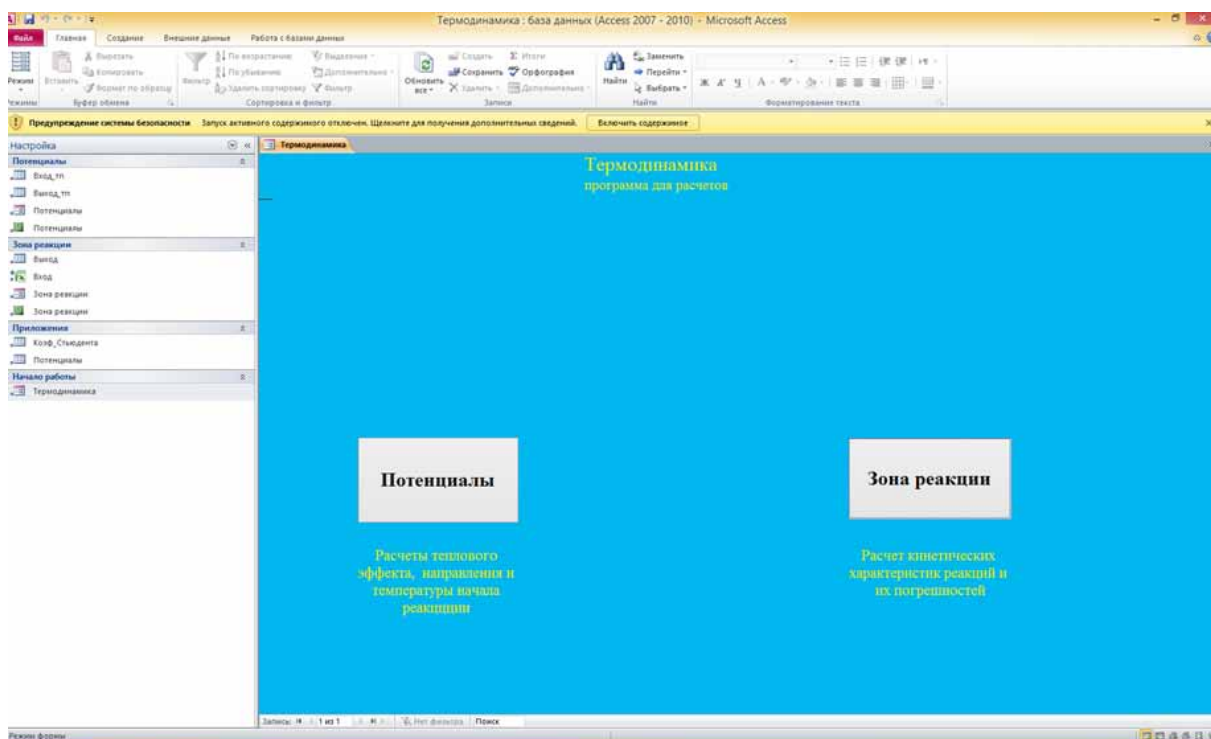
$$\frac{dk}{k} = k_p \frac{\sigma_y}{\sqrt{n}}, \quad 5$$

где σ_y – среднеквадратическое отклонение экспериментальных значений $\ln(1-\alpha)$ от средних, n – число отсчётов времени. Если в результате расчёта погрешности вычисления констант скорости в предположении о степенном законе получились малыми, а в предположении об уравнении Авраами большими, то зависимость от времени является степенной и реакция протекает в кинетической зоне, и наоборот. В отдельных случаях возникает ситуация, что реакция протекает при низких температурах в диффузионной зоне, а при высоких – в кинетической. Пример – реакция спекания каолина с гидродифторидом аммония, которая при температуре 50 °С проходит в диффузионной зоне, а начиная с 100 °С – в кинетической.

Расчёты компьютеризованы в программе, доложенной в [3-6]. Первая версия реализована средствами Microsoft Access на основе макросов. В новой версии большинство функций удалось передать процедурам Visual Basic for Application. Использование процедур vba облегчило интерфейс и реализовало ряд новых возможностей. Так, ветви программы для кинетических расчётов (по степенному закону и уравнению Авраами) объединены в одну (Зона реакции), которая позволяет сопоставлять константы скорости и погрешности определения разными методами в одной форме, что упрощает решение вопроса о зоне реакции.

Программа содержит блоки: Потенциалы и Зона реакции. Первая посвящена расчётам по химической термодинамике: определению направлений реакции (вычислением изменений потенциала Гиббса) и тепловых эффектов (вычислением изменений энтальпии). Вторая позволяет проводить расчёты по химической кинетике: константы скорости, энергии активации и погрешности вычисления, а также решать вопрос о механизме реакции при каждой вычисляемой температуре.

Каждая ветвь программы (Потенциалы и Зона реакции) содержит по четыре объекта: две таблицы (одна для ввода, другая для вывода данных), форму с прикреплённой процедурой (выборка данных из таблиц, вычисление и заполнение выходных таблиц) и отчёт с выходными данными (основное назначение – экспорт данных в rtf). Для ввода данных во входную таблицу ветви Зона реакции используется связанная таблица Excel. Группа Приложе-



Стартовая форма программы Термодинамика в окне программы Microsoft Access 2007.

ния содержит две Таблицы со справочными данными: одну с коэффициентами Стьюдента для расчётов погрешностей вычисления констант скоростей и энергий активации, вторую со значениями термодинамических потенциалов и их производных при стандартных условиях для 150 веществ, наиболее часто встречающихся при фторидной переработке алюмосиликатов. Группа Начало работы содержит стартовую форму Термодинамика (рис.).

Список литературы

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия. М.: Высшая школа, 1999. 528 с.
2. Бочкарёв В.В. Теория химико-технологических процессов органического синтеза. Гетерофазные и гетерогенно-каталитические реакции. Томск: Изд-во ТПУ, 2005. 124 с.
3. Пушкин А.А., Леонтьев М.А. Программа для расчёта термодинамических величин на основе приложения Microsoft Access 2007 // Математические исследования в естественных науках. Тр. IX Всерос. научн. школы. Апатиты, 10-11 окт. 2013 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2013. С. 68-72.
4. Пушкин А.А., Римкевич В.С., Маловицкий Ю.Н. и др. Автоматизация расчётов термодинамических равновесий в процессе переработки алюмосиликатного сырья по фторидной технологии // Математические исследования в естественных науках. Тр. V Всерос. научн. школы. Апатиты, 12-14 окт. 2009 г. Апатиты: Изд-во ГИ КНЦ РАН, 2009. С. 225-228.
5. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик физико-химических процессов при переработке силикатного сырья фторидным методом // Математические исследования в естественных науках. Тр. VII Всерос. научн. школы. Апатиты, 3-6 окт. 2011 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2011. С. 118-123.
6. Пушкин А.А., Белов Р.В., Римкевич В.С. Автоматизация расчётов кинетических характеристик твёрдофазных физико-химических процессов // Математические исследования в естественных науках. Тр. VIII Всерос. научн. школы. Апатиты, 15-16 окт. 2012 г. Апатиты: Изд-во К & М, 2012. С. 26-30.

ТЕОРИЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ КАК АЛЬТЕРНАТИВНАЯ МЕТОДИЧЕСКАЯ ОСНОВА ИЗУЧЕНИЯ ШУМАНОВСКИХ РЕЗОНАНСОВ

Пчёлкин В.В.

Полярный геофизический институт, г. Апатиты

Изучен вопрос о вероятностях появления квазипериодических сигналов разной длительности в записях электромагнитных шумов на частотах шумановских резонансов. Описаны методические аспекты применения теории распознавания образов для отбора событий требуемого морфологического вида. Подвергнута критике гипотеза о возможном биологическом влиянии продольных шумановских резонансов на биологические процессы.

Введение

Предсказанные Шуманом резонансные электромагнитные колебания в полости Земля ионосфера на частотах, задаваемых формулой $f_n \approx 6,0\sqrt{n(n+1)}\tilde{A}\ddot{o}$, где n – номер резонансной моды, экспериментально обнаружены многими исследователями [1-3]. Приведём динамический спектр, полученный в результате спектрального анализа экспериментального ряда, полученного 15.09.2006 (рис. 1). Видно усиление цвета в районе 7.8 Гц, подтверждающее резонансное усиление.

Г. Кёниг был одним из первых, кто обратил внимание на близость частоты первой резонансной моды α -ритму головного мозга. В. Людвиг издал книгу «Информативная медицина», в которой высказал гипотезу о влиянии шумановских резонансов на биологические объекты, прежде всего – человеческий организм. Идея получила развитие во множестве научных работ, по-

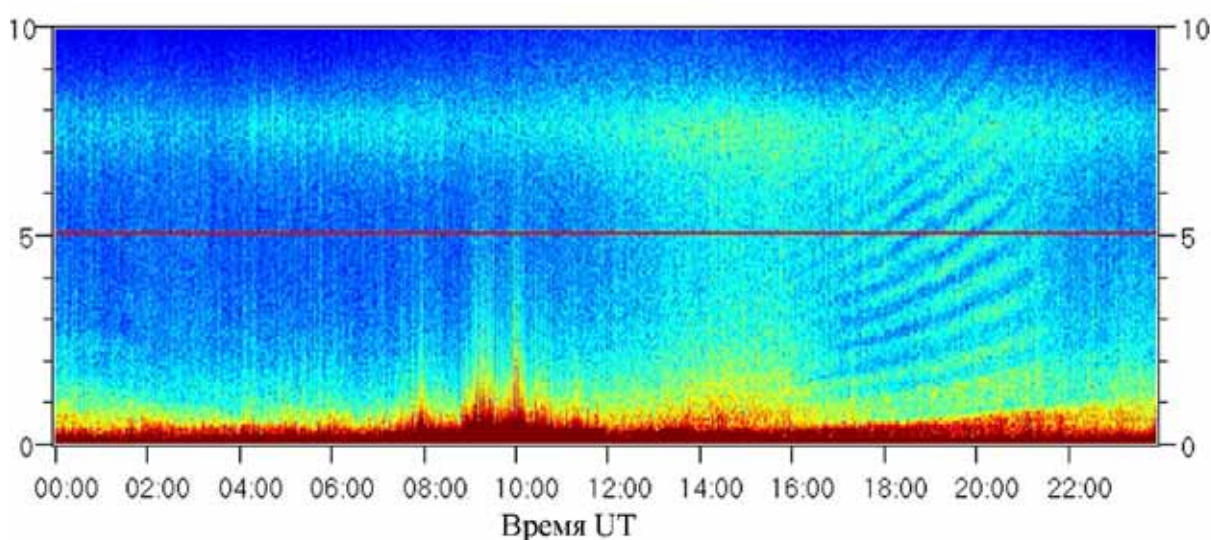


Рис. 1. Динамический спектр шумового ЭМП, полученный в ходе эксперимента в обсерватории «Ловозеро» 15.09.2006. Горизонтальная магнитная компонента «север-юг».

пулярных журналах и фантастических рассказах. Но беспристрастный анализ литературы показывает, что убедительные свидетельства такого влияния отсутствуют. Одной из причин этого может быть шумовой характер колебаний. Действительно, первый взгляд на характер осциллограммы (рис. 2) не рождает мысли о колебательном процессе фиксированной частоты. Говоря о колебаниях в этом частотном диапазоне, часто употребляют термин «шумовые». Но как это совместить с усилением коэффициента разложения в районе гармоники 7.8 Гц, на которое указывают методы спектрального анализа?

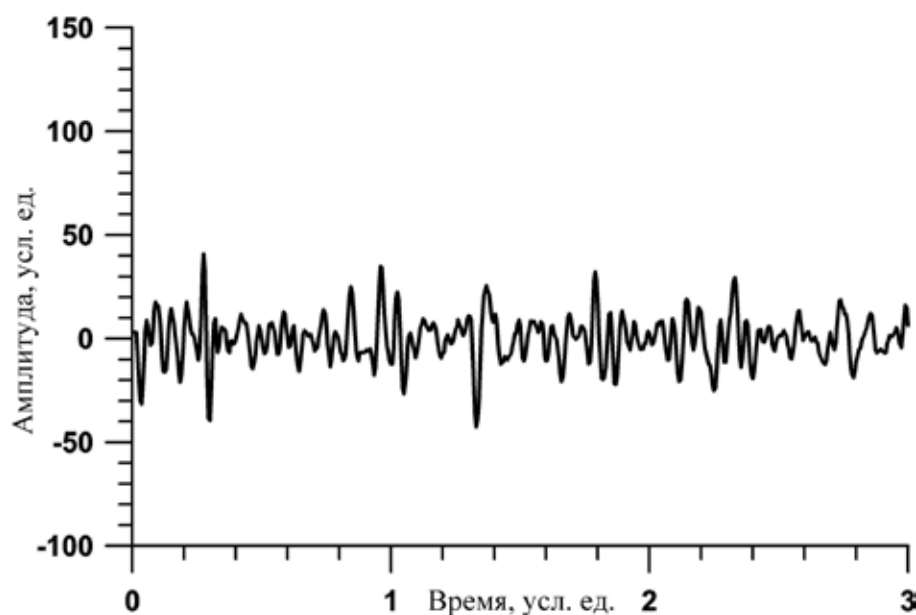


Рис. 2. Образец осциллограммы магнитной компоненты «север-юг» после цифровой фильтрации.

В этой работе автор попытался устранить это противоречие, посмотрев на проблему с другой стороны. Была поставлена задача прямой оценки частоты фрагментов непрерывных квазипериодических колебаний в зависимости от их длительности. Для решения задачи привлечены методы теории распознавания образов, которые позволяют автоматизировать морфологический анализ экспериментальных рядов, получить интересные выборки событий и провести их статистические оценки.

Экспериментальные данные и их обработка, описание дескрипторов.

Экспериментальным материалом для анализа были оцифрованные (частоты квантования 40, 200 и 500 Гц) измерения горизонтальной компоненты магнитного поля, проводимые на магнитной обсерватории Ловозеро 2 в 2006-2009 гг. Методами цифровой фильтрации выделялась полоса 6-15 Гц. При помощи анализа динамических спектров и амплитудных распределений исключались записи, сопровождавшиеся техногенными помехами и магнитосферными возмущениями. Для выделения интересных нас выборок событий (ими были квазипериодические фрагменты осциллограмм разной длительности – с квазиэкспоненциальным снижением амплитуды и без него) применялись два дескриптора.

Показатель превышения амплитуды, который рассчитывался по максимальному значению модуля измеряемой величины в i -ом фрагменте:

$$b_{1,i} = \max(a_{i,j}) \quad 1$$

где i – номер фрагмента исходного ряда, j – номер измерения в оцифровке фрагмента.

Показатель периодичности – отношение максимальной и минимальной длительностей среди всех j -х интервалов знакопостоянства величины в i -м фрагменте; близость к 1 этого дескриптора говорит о высокой упорядоченности смены знака измеряемой величины:

$$b_{2,i} = \frac{\max T_{i,j}}{\min T_{i,j}} \quad 2$$

где j – номер интервала знакопостоянства во фрагменте. Исходными таксономическими единицами были фрагменты экспериментального ряда с длительностью не менее заданной. Задавая количественные границы дескрипторов, можно получить интересующие нас события и оценить далее статистические характеристики выборок. По сути, такая постановка – типичная классификационная задача [4- 6]. В результате квазипериодические фрагменты будут одним из классов.

Обсуждение результатов

Результатом работы классификационных программ стали выборки квазипериодических фрагментов разной длительности (рис. 3). В выборку попадает некоторое число всплесков Q-типа [6, 8-10].

Расчеты средней частоты таких фрагментов подтвердили, что колебания происходят на частоте около 7.8 Гц. На рис. 4 показан типичный вид распределения отобранных квазипериодических фрагментов по частотам. Это второстепенный, но любопытный результат (признак частоты при отборе не использовался), подтверждающий резонансную природу отобранных событий.

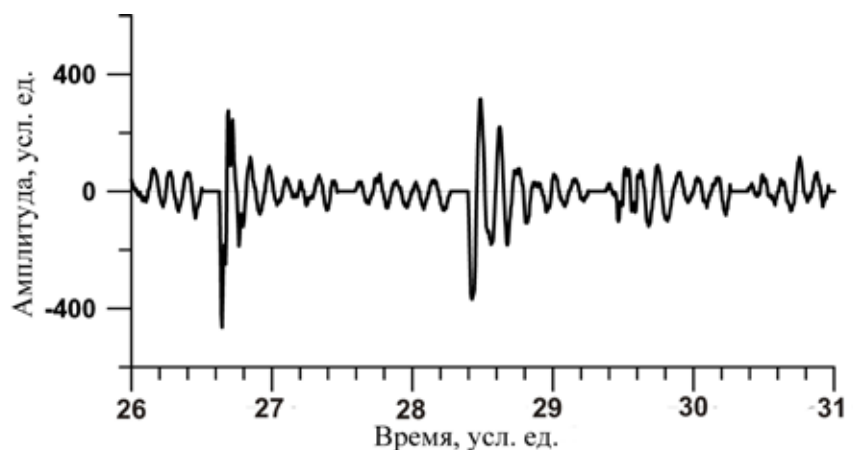


Рис. 3. Образцы отобранных автоматически из экспериментального ряда квазипериодических колебаний длительностью 4 и более квазипериодов.

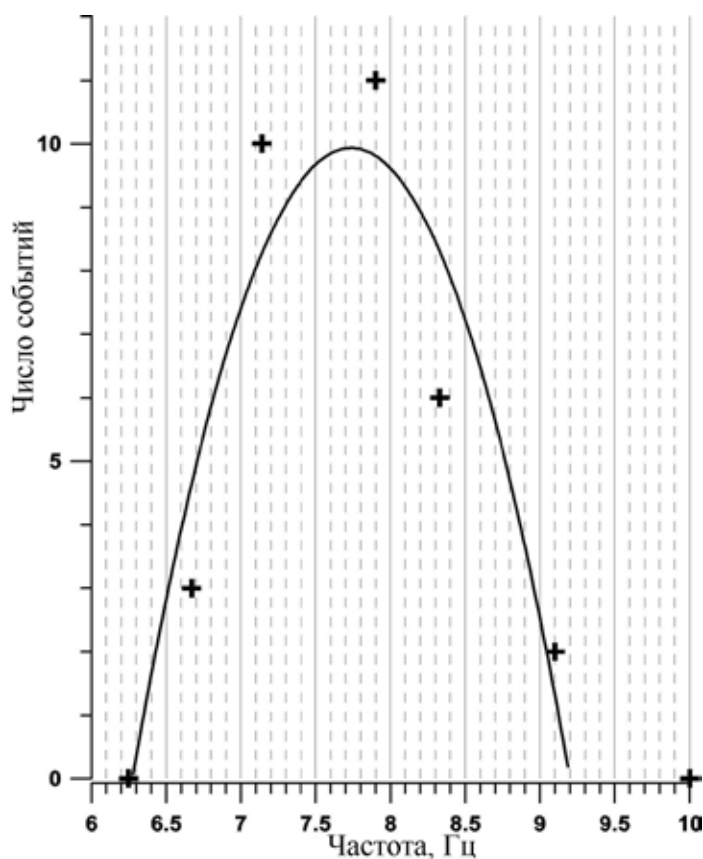


Рис. 4. Типичный вид распределения отобранных квазипериодических событий по частотам.

Оценки частоты появления таких фрагментов в экспериментальных рядах показывают их редкость. Если говорить о совсем коротких фрагментах квазипериодических колебаний, длящихся хотя бы 3-4 периода (примерно 0.36-0.48 с) и более, то даже они составляют порядка 0.1 % от всего ряда в суммарной продолжительности. Причем фаза колебаний от одного такого фрагмента к другому изменяется случайно. Если говорить о суммарной продолжительности фрагментов в 5 и более квазипериодов, то она составляет уже менее 0.02 % во всей записи.

Таким образом, несмотря на то, что существование резонатора бесспорно, длительно сохраняющегося колебания в нём нет. Экспериментатор сказал бы, что наблюдает просто шумы. Причин этого две. Первая – случайный характер источников колебаний в резонаторе (грозовых разрядов) по времени, координатам и характеристикам. Вторая – сильное затухание колебаний, добротность 2.5-3.0.

Важность данного результата легко понять – подстройка биологические объекты наблюдается не просто на сам резонатор, которых в окружающем мире немало, а на периодический процесс в нём. Примеров подстройки к периодическим явлениям много. Достаточно вспомнить смену сезонов года и приспособляемость животных и растений к ней, суточные ритмы и т.д.

Результат морфологического анализа ряда не противоречит результатам спектрального анализа. Методы оценки резонансных частот (например, метод Велча) основаны на усреднениях и перекрытиях интервалов времени. Они должны демонстрировать некоторое усиление гармоник 7.8 Гц, откликаясь на осязаемое количество квазипериодических фрагментов колебаний этой частоты, присутствующих в рядах и найденных методами теории распознавания образов.

Выводы

В рамках теории распознавания образов разработана методика количественного морфологического анализа суточных осциллограмм горизонтальной магнитной компоненты шумового электромагнитного поля КНЧ

диапазона. Получены оценки вероятностей квазипериодических фрагментов разной длительности в экспериментальных рядах. Они показывают относительную редкость достаточно длинных фрагментов (десятые и сотые доли % для фрагментов длиной от 4 и более квазипериодов). В резонаторе земля-ионосфера длительно сохраняющиеся колебания отсутствуют. Причина этого кроется в сильном затухании колебаний в резонаторе (добротность порядка 2.5-3. 0) и множественном случайном характере действующих источников (около 44 ударов молний в секунду в глобальном масштабе). В силу предыдущего тезис о возможном влиянии шумановских резонансов на биологические процессы представляется сомнительным.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы ОФН РАН «Физика атмосферы: электрические процессы, радиофизические методы исследований».

Список литературы

1. Александров М.С. и др. Флуктуации электромагнитного поля Земли в диапазоне СНЧ. М.: Наука, 1972. 100 с.
2. Блюх П.В., Николаенко А.С., Филиппов Ю.В. Глобальные электромагнитные резонансы в полости земля-ионосфера. Киев: Наук. думка, 1977. 250 с.
3. Крылов С.М., Владимиров Н.П. Некоторые характеристики электромагнитных резонансов полости Земля-ионосфера // Геомагнитные исследования. 1967. № 9. С. 80-88.
4. Вапник В.Н., Червоненкис А.Я. Теория распознавания образов (статистические проблемы обучения). М.: Наука, 1974. 415 с.
5. Загоруйко Н.Г. Методы распознавания и их применение. М.: Сов. радио, 1972. 206 с.
6. Пчёлкин В.В., Белоглазов М.И., Васильев А.Н. и др. Всплески Q-типа в магнитных колебаниях КНЧ диапазона как явление, отражающее свойства глобального резонатора Земля-ионосфера // Геомагнетизм и аэрономия. 2010. Т. 50. № 5. С. 1-9.
7. Lones D.L., Kemp D.T. The nature and average magnitude of the sources of transient excitation of Schumann resonances // JATP. 1971. V. 33. P. 557-566.
8. Ogawa T., Kozai K., Kawamoto H. et al. Huzita-Schumann resonances observed with a balloon in the stratosphere // JATP. 1979. V. 41. P. 135-142.
9. Ogawa T., Tanaka Y., Fraser-Smith A.C. et al. Worldwide simultaneity of a Q-type ELF burst in the Schumann resonance frequency range // J. Geomagnetism and Geoelectricity. 1967. V. 19. N 4. P. 377-384.
10. Ogawa T., Tanaka Y., Miura T. et al. Observations of natural ELF and VLF electromagnetic noises by using ball antennas // J. Geomagnetism and Geoelectricity. 1966. V. 18. N 4. P. 443-454.

ПРИРОДНЫЙ И ТЕХНОГЕННЫЙ СТАТУС МИКРОЭЛЕМЕНТОВ В ТОНКОЙ ФРАКЦИИ РЕЧНЫХ ДОННЫХ ОТЛОЖЕНИЙ УРБАНИЗИРОВАННОЙ СРЕДЫ

Слуковский З.И.

Институт геологии КарНЦ РАН, г. Петрозаводск, slukovsky87@gmail.com

Проведено исследование микроэлементного состава речных донных отложений (< 0.1 мм) малых городских водотоков на примере двух рек г. Петрозаводска. По результатам факторного анализа установлены основные закономерности накопления элементов в осадках, связанные с влиянием общего геохимического фона и активным техногенным воздействием на водные экосистемы. Определены приоритетные загрязнители донных отложений городских рек (V, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Sb, W, Pb), что позволяет ориентироваться на этот список элементов в планировании эколого-геохимических работ.

Применение статистических методов обработки данных необходимо в геохимии. При этом первичный анализ результатов лабораторных исследований, выраженных в цифровом формате (определение среднего / медианы, коэффициентов корреляции, критериев Стьюдента и Манна-Уитни и т.д.), позволяет выявить лишь общие закономерности, лежащие на поверхности. Более глубокие исследования возможны при использовании методов многомерной статистики, например, факторного анализа, широко применяемого в геохимии. В экологической геохимии, рост интереса к которой с каждым годом всё увеличивается, применение факторного анализа позволяет расши-



Рис. 1. Схема района исследования.

ритель представления о миграции и аккумуляции химических элементов на техногенно нарушенных территориях и пограничных районах. Цель работы – выявить основные факторы формирования микроэлементного состава тонкой фракции речных отложений в урбанизированной среде. Ключевые объекты исследования – р. Лососинка и Неглинка (Респ. Карелия), протекающие по территории г. Петрозаводска и впадающие Онежское оз. (рис. 1).

Химический состав фракции <0.1 мм донных отложений водотоков – надёжный индикатор техногенного воздействия, оказываемого на водные экосистемы [5]. В этой работе приводятся результаты 79 ICP-MS-измерений речных осадков городских участков Лососинки и Неглинки в аналитической лаборатории ИГ КарНЦ РАН (аналитики Утицина В.Л., Полищук А.И., Парамонов А.С.) по 40 микроэлементам: Li, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Sn, Sb, W, Pb, Zr, P, Sc, Ti, Ga, Rb, Sr, Y, Cs, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Th и U. Факторный анализ методом главных компонент проводился с помощью программы PSPP 0.8.3 (метод вращения факторов – веримакс). Значения вариант выборок по каждому элементу предварительно нормализованы средствами Microsoft Excel 2007. Графические изображения выполнены при помощи программ Inkscape 0.48.4, EasyCapture 1.2.0 и Triplot 4.1.2.

Установлены 3 фактора с суммарным вкладом в общую дисперсию 77.5 %, которые преимущественно определяют общий микроэлементный состав исследованных речных отложений городской среды (табл. 1). Фактор 1 объединяет высокочargedные элементы-примеси (лантаноиды, Zr, Hf, U, Th, Y и Ti), обычно малоподвижные в геологических средах [1], а также транзитный Cr. Это фактор интенсивного природного влияния на формирование донных осадков. Высокий коэффициент корреляции Cr с этим фактором не случаен, так как он широко распространён в ультраосновных породах Карелии [4].

Таблица 1. Факторная модель микроэлементного состава речных отложений урбанизированной среды.

№ фактора (величина и % от общей дисперсии)	Микроэлементы в донных отложениях (нагрузка на фактор)*
1 (17.3 и 43.7 %)	Tb (0.99), Y (0.98), Nd (0.98), Sm (0.98), Ho (0.98), Er (0.98), Tm (0.98), Dy (0.96), U (0.96), La (0.95), Ce (0.93), Gd (0.93), Yb (0.92), Pr (0.86), Lu (0.83), Hf (0.83), Th (0.82), Zr (0.79), Eu (0.68), Ti (0.66), Cr (0.60)
2 (8.4 и 21.2 %)	Ni (0.96), Zn (0.90), Cu (0.89), Co (0.84), Cs (0.84), Sb (0.76), P (0.71), Li (0.68), W (0.67), Pb (0.66), Sn (0.55), Mo (0.53), Rb (0.52), Ba (0.46), Cr (0.42), V (0.37)
3 (5.0 и 12.6 %)	Ga (0.84), Sc (0.82), Sr (0.79), V (0.75), Ti (0.59), P (-0.44), Pr (-0.45), Li (-0.55), Mn (-0.65)

* Элементы расположены в порядке убывания нагрузки на фактор.

Таблица 2. Факторные нагрузки элементов техногенного статуса.

Элементы	Факторы		
	1	2	3
Li	0.30	0.89	-0.05
V	0.54	-0.37	0.44
Cr	0.05	0.20	0.79
Co	0.74	0.42	0.11
Ni	0.69	0.57	0.34
Cu	0.88	0.18	0.34
Zn	0.80	0.45	0.15
Mo	0.67	0.09	-0.08
Sn	0.37	0.04	0.73
Sb	0.79	0.15	0.24
W	0.71	0.07	0.28
Pb	0.54	0.19	0.45
P	0.44	0.71	-0.03
Rb	0.02	0.91	0.09
Ba	0.52	0.64	0.30
Cs	0.03	0.62	0.33
дисперсия	5.30	3.90	2.20
вес фактора, %	33.10	24.40	13.60

Фактор 2 включает крупноионные литофильные элементы и транзитные элементы-примеси, обладающие значительной подвижностью при геологических процессах [1, 3], а также биогенный P. Этот фактор объединяет большинство типичных элементов-загрязнителей антропогенно нарушенной природной среды из числа тяжёлых металлов. Это позволяет говорить об увеличении миграционной способности данных элементов на урбанизированной территории, а также об увеличении нагрузки указанными элементами на изучаемые водные объекты со стороны городской среды. Это фактор активного влияния техногенеза на химический состав современных речных отложений в пределах крупного города.

Фактор 3 – это фактор рассеянных элементов (Ga, Sc, Sr, V, Ti). Отрицательные факторные нагрузки P, Pr, Li и Mn говорят о наличии их концентраторов в донных отложениях рек – органического вещества, силикатов и слюдистых минералов.

Факторный анализ, включавший в себя данные по концентрациям микроэлементов активного воздействия техногенеза в донных отложениях р. Лососинки и Неглинки, позволил дифференцировать все компоненты системы на три фактора, суммарный вклад которых составляет 71.0 % от общей дисперсии исходных данных (табл. 2).

К первому фактору тяготеют почти все тяжёлые металлы, приуроченность которых к влиянию промышленности, автомобильного и железно-

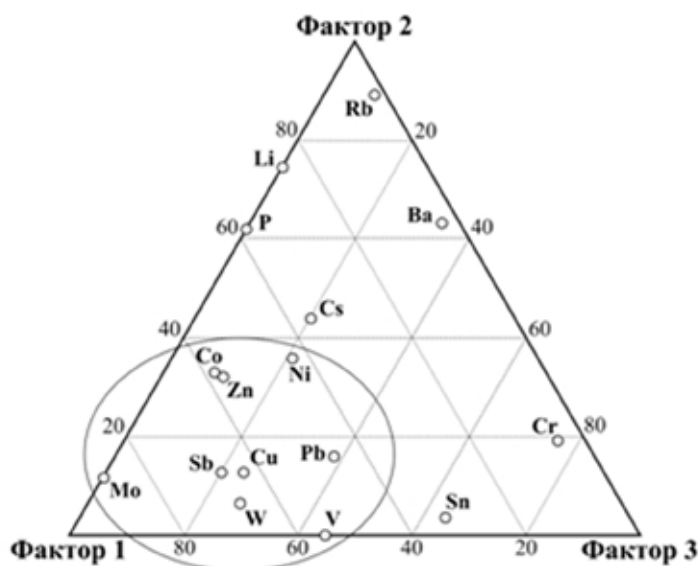


Рис. 2. Диаграмма факторных нагрузок, выделена область тяжёлых металлов.

фону городского ландшафта. Таким образом, приоритетными загрязнителями р. Лососинки и Неглинки являются V, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Sb, W и Pb – элементы первого, второго и третьего классов экологической опасности (рис. 2).

Результаты факторного анализа микроэлементного состава донных отложений рек г. Петрозаводска позволили выделить элементы природного геохимического фона и техногенного статуса, концентрирующиеся в речных осадках вследствие активного антропогенеза. Интерпретация результатов не завершена, но приведенные расчёты принесут пользу в планировании эколого-геохимических исследований в Карелии и понимании сложных механизмов поведения микроэлементов на техногенно нарушенных территориях.

Список литературы

1. Сляров Е.В. и др. Интерпретация геохимических данных. М.: Интермет Инжиниринг, 2001. 288 с.
2. Крутских Н.В. Применение факторного анализа при геоэкологических исследованиях г. Петрозаводска // Геохимия и минералогия крупных городов. Матер. межд. конф. СПб.: Изд-во ВВМ, 2013. С. 38-40.
3. Перельман А.И. Геохимия. М.: Высш. школа, 1989. 528 с.
4. Рыбникова З.П., Светов С.А. Геохимия акцессорных хромитов из мезоархейских коматиитов Центр. Карелии на примере Совдозерской структуры // Тр. КарНЦ РАН. 2014. № 1. С. 158-166.
5. Слуковский З.И., Бубнова Т.П. Химический состав фракции < 0.1 мм отложений р. Неглинки – индикатор загрязнения городского водотока // Уч. зап. ПетрГУ. 2013. № 4. С. 50-56.

дорожного транспорта в городской среде не вызывает сомнения. В почвенном покрове г. Петрозаводска, генетически близком к донным отложениям рек, эти элементы также имеют техногенный статус [2]. Второй фактор объединяет Р и крупноионные литофильные элементы, которые мигрируют и аккумулируются в речных осадках вместе с поллютантами. Третий фактор включает Cr и Sn, тяготеющие к природному геохимическому

МОДЕЛИРОВАНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО СИГНАЛА КОНЦЕНТРАЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ В ВЫХЛОПАХ АВТОМОБИЛЬНОГО ТРАНСПОРТА

Трунов В.А., Хламов М.Г.

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк, ic@donntu.edu.ua

Загрязнение атмосферного воздуха выхлопами автомобильного транспорта – одна из самых серьёзных экологических проблем промышленных городов. Влияние загрязнения воздуха на здоровье человека проявляется через сокращение средней продолжительности жизни, увеличение числа преждевременных смертей, рост заболеваемости и негативное влияние на развитие детей. Углеводороды, образующиеся в результате неполного сгорания топлива в двигателе внутреннего сгорания (ДВС), опасны не только сами по себе, но и вступают в реакцию с оксидами азота, образуя ещё более опасные соединения. Первый этап создания измерительного канала концентрации суммы углеводородов – получение математической модели их спектральных характеристик.

Введение

Загрязнение атмосферного воздуха выхлопами автомобильного транспорта – одна из самых серьёзных экологических проблем промышленных городов. Влияние загрязнения воздуха на здоровье человека проявляется через сокращение средней продолжительности жизни, увеличение количества преждевременных смертей, рост заболеваемости и негативное влияние на развитие детей. Углеводороды, выбрасываемые автомобильными двигателями, под действием солнечного света вступают в реакцию с оксидами азота, выбрасываемые двигателями, котельными установками и промышленными печами. В результате протекают фотохимические реакции с образованием озона, радикалов и различных перекисей, вызывающих раздражение глаз, повреждение растительности, разрушение резины.

Помимо экологического контроля, измерение углеводородов в выхлопах автомобильного транспорта позволяет судить о неисправностях двигателей внутреннего сгорания (ДВС) и причинах, устранение которых повышает экологичность автомобиля. Измерение углеводородов существенно расширяет анализ сгорания. Оно делает возможным, например, показания о качестве сгорания. Измерение концентрации C_xH_y широко применяется для регулировки смеси холостого хода и оценки состояния двигателя.

Современные автомобильные газоанализаторы измеряют сумму углеводородов не избирательно, что приводит к невозможности учёта влияния соотношения компонентов углеводородов на результаты. В этой работе предлагается измерительный канал концентрации суммы углеводородов,

построенный на основе избирательного измерения концентраций отдельных составляющих [1].

Методы измерения концентрации углеводородов

Среди методов определения концентрации углеводородов в выхлопах автомобильного транспорта можно выделить пламенную ионизацию, оптико-абсорбционный и оптико-акустический методы.

Пламенно-ионизационный метод основан на ионизации углеводородов в водородном пламени. В чистом пламени содержание ионов незначительно. При введении углеводородов в пламя число образующихся ионов значительно увеличивается. Если приложить электрическое поле между коллектором и горелкой, возникает ток, значение которого прямо пропорционально концентрации углеводородов, введённых в пламя. Ток измеряют электрометрическим усилителем, к выходу которого обычно подключен самописец [2].

Оптико-акустический относится к большому классу спектрально-оптических методов, применяющихся для количественного анализа газов и жидкостей. Количественный анализ газов на основе этих методов основан на использовании поглощения света. Определяют мощность монохроматического излучения с заданной частотой, проходящего через однородную среду, содержащую поглощающий компонент. Регистрируя мощность излучения, получают выходной сигнал, связанный с концентрацией измеряемого компонента.

Оптико-абсорбционный метод основан на поглощения оптического излучения молекулами анализируемого вещества в какой-либо части спектра. Поглощение излучения происходит при совпадении спектральных линий излучения и линии поглощения вещества. Количество поглощённой энергии определяется количеством молекул, а избирательность – строгой индивидуальностью спектров поглощения. За основу разрабатываемого измерительного канала концентрации суммы углеводородов взят оптико-абсорбционный метод измерения как наиболее селективный и чувствительный.

Математическое описание спектральной характеристики поглощения углеводородов

Для построения оптического измерительного канала суммы углеводородов в выхлопах автомобильного транспорта необходимо определить полосу поглощения суммы углеводородов. В качестве основных контролируемых компонентов в выхлопах ДВС выступают: метан CH_4 , этан C_2H_6 , пропан C_3H_8 , бутан C_4H_{10} , пентан C_5H_{12} , гексан C_6H_{14} , гептан C_7H_{16} . В программе моделирования спектральных характеристик химических соединений *Hitran spectra* получены модели спектральных характеристик основных составляющих суммы углеводородов. На рис. 1 дана спектральная характеристика поглощения метана. Аналогичные характеристики получены для остальных составляющих суммы углеводородов.

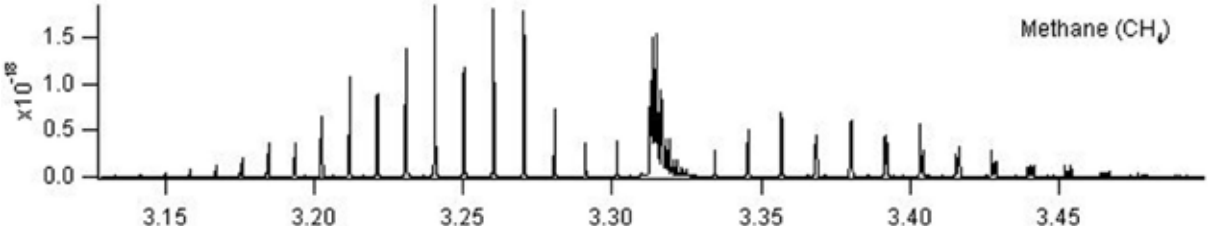


Рис. 1. Спектральная характеристика поглощения метана.

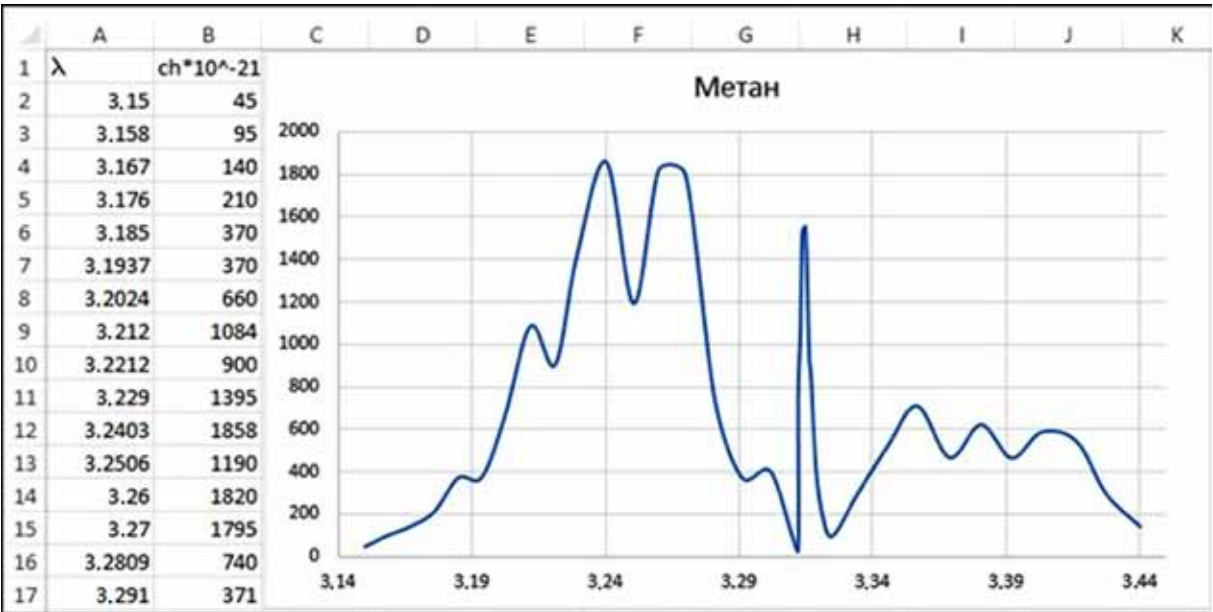


Рис. 2. Аналитическое описание спектра поглощения метана.

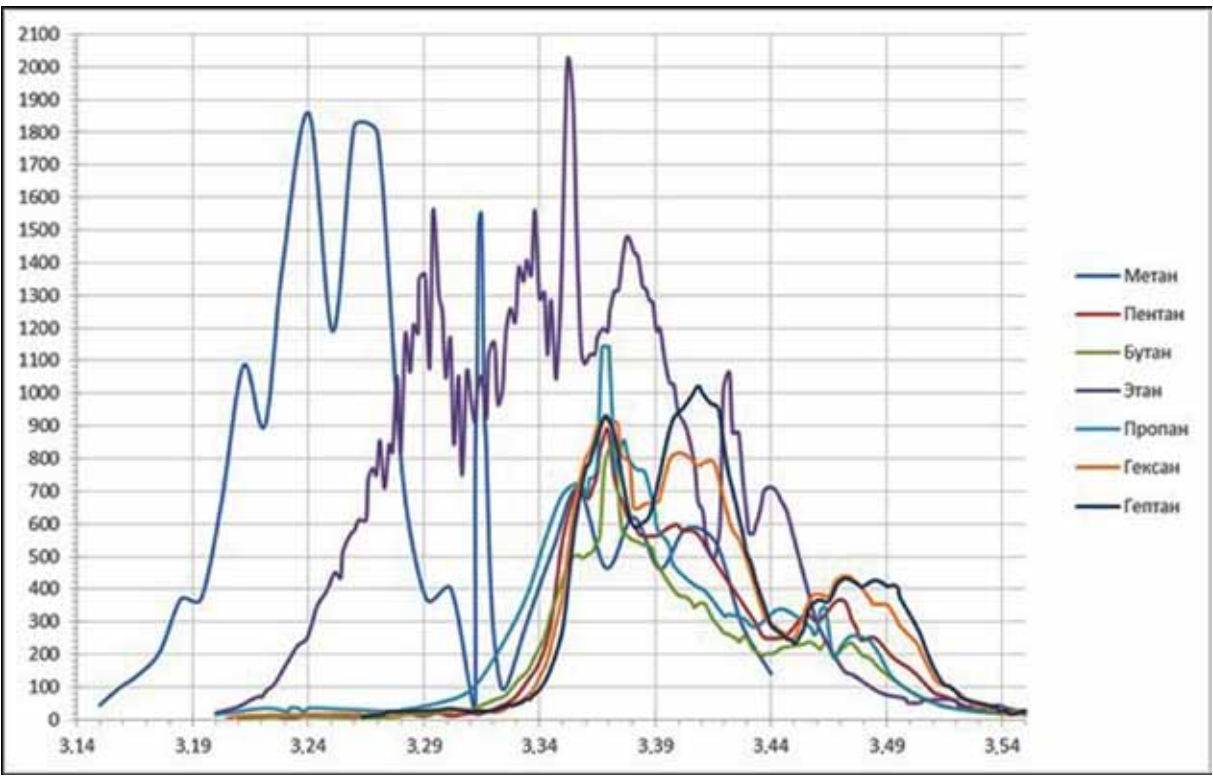


Рис. 3. Аналитическое описание спектра поглощения основных углеводородов.

Далее необходимо построить огибающие полученных спектров, для чего градуируем спектры средствами *Microsoft Visio*. В ходе градуировки получим массив точек, координаты которых соответствуют коэффициенту поглощения метана на определенной длине волны. На рис. 2 дано аналитическое описание спектра поглощения метана. Аналогичным образом получено аналитическое описание остальных элементов суммы углеводородов с использованием пакета *Microsoft Excel*. На рис. 3 дано аналитическое описание основных компонентов суммы углеводородов в выхлопах автомобильного транспорта.

Используя метод наименьших квадратов (МНК) аппроксимируем спектры поглощения. В результате получим полином, воспроизводящий спектральную характеристику каждой составляющей суммы углеводородов [3]. На рис. 4 дан график спектра поглощения метана, полученный средствами *Mathcad* после аппроксимации числовых данных методом МНК.

При дальнейшем моделировании данные спектра поглощения метана осреднены. Получена интегральная характеристика спектра поглощения метана с учетом плотности линий. Её график показан на рис. 5.

Согласно рис. 5, пик поглощения метаном ИК-излучения приходится в диапазоне от 3.3 до 3.35 мкм. Для удобства дальнейшего моделирования оптического канала необходимо использовать график зависимости коэффи-

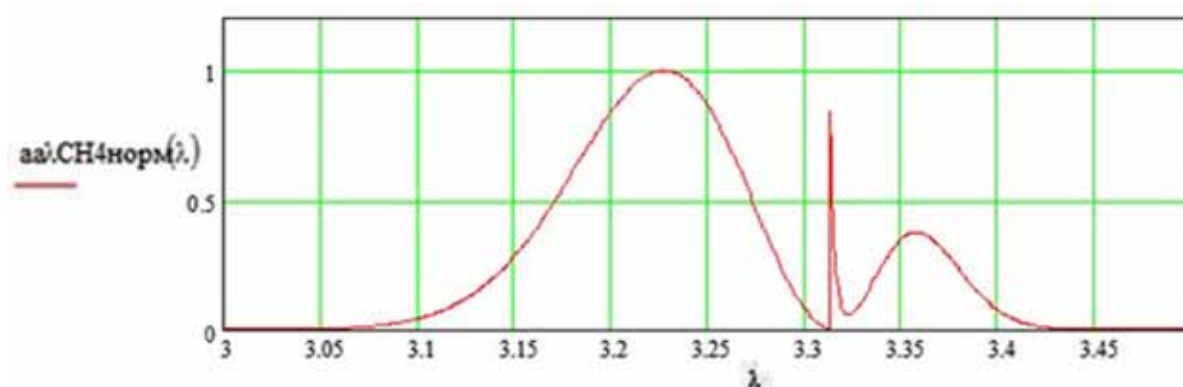


Рис. 4. График спектра поглощения метана.

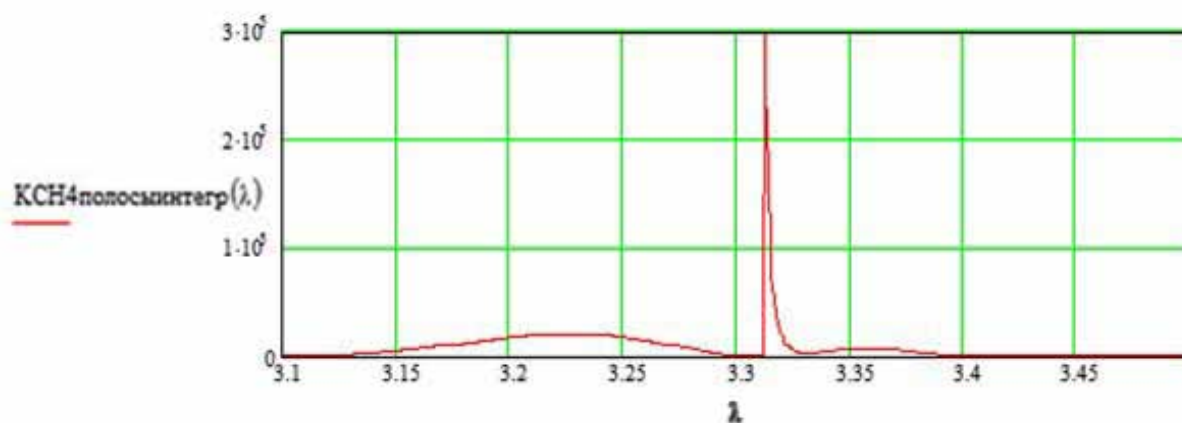


Рис. 5. Интегральная характеристика спектра поглощения метана.

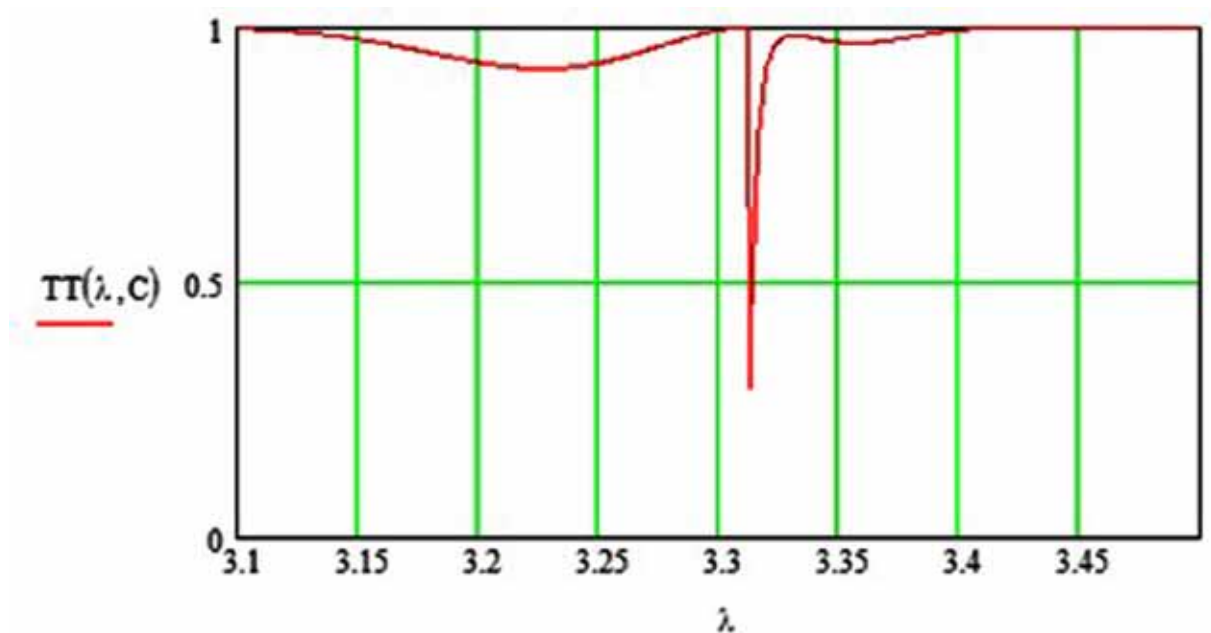


Рис. 6. Зависимость коэффициента пропускания метана от длины волны излучения.

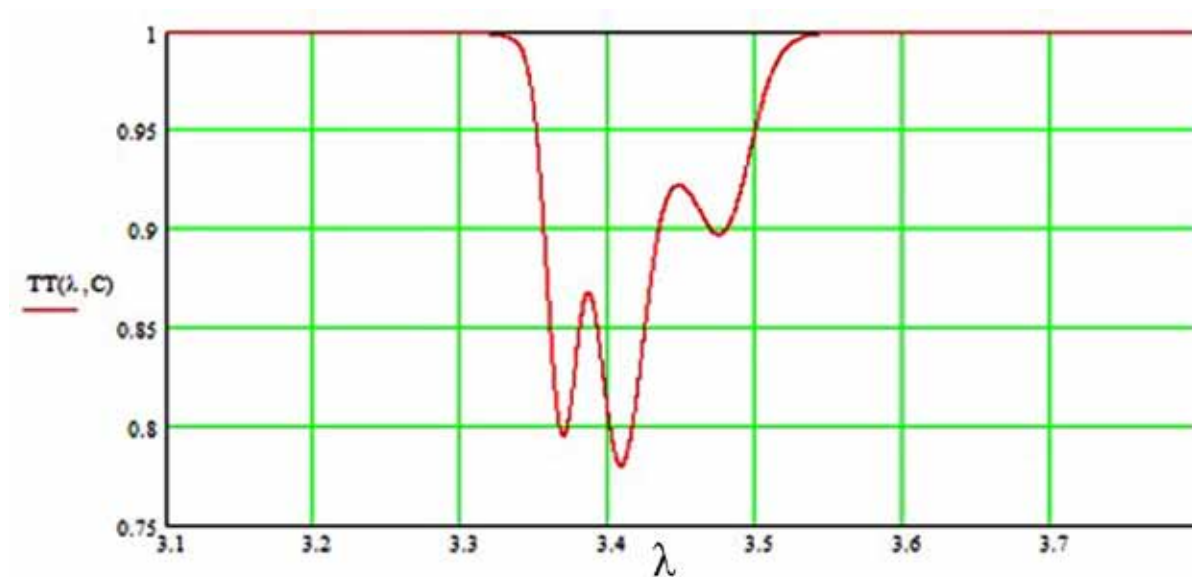


Рис. 7. Зависимость коэффициента пропускания суммы углеводородов от длины волны излучения.

циента пропускания метана от длины волны (рис. 6). На рис. 7 дан график зависимости коэффициента пропускания суммы углеводородов от длины волны.

На рис. 8 красной линией показан спектр выходного сигнала, пунктирной синей линией – спектр входного сигнала оптического канала с учетом потерь излучения в оптическом канале. По разнице входного и выходного сигнала можно судить о концентрации суммы углеводородов.

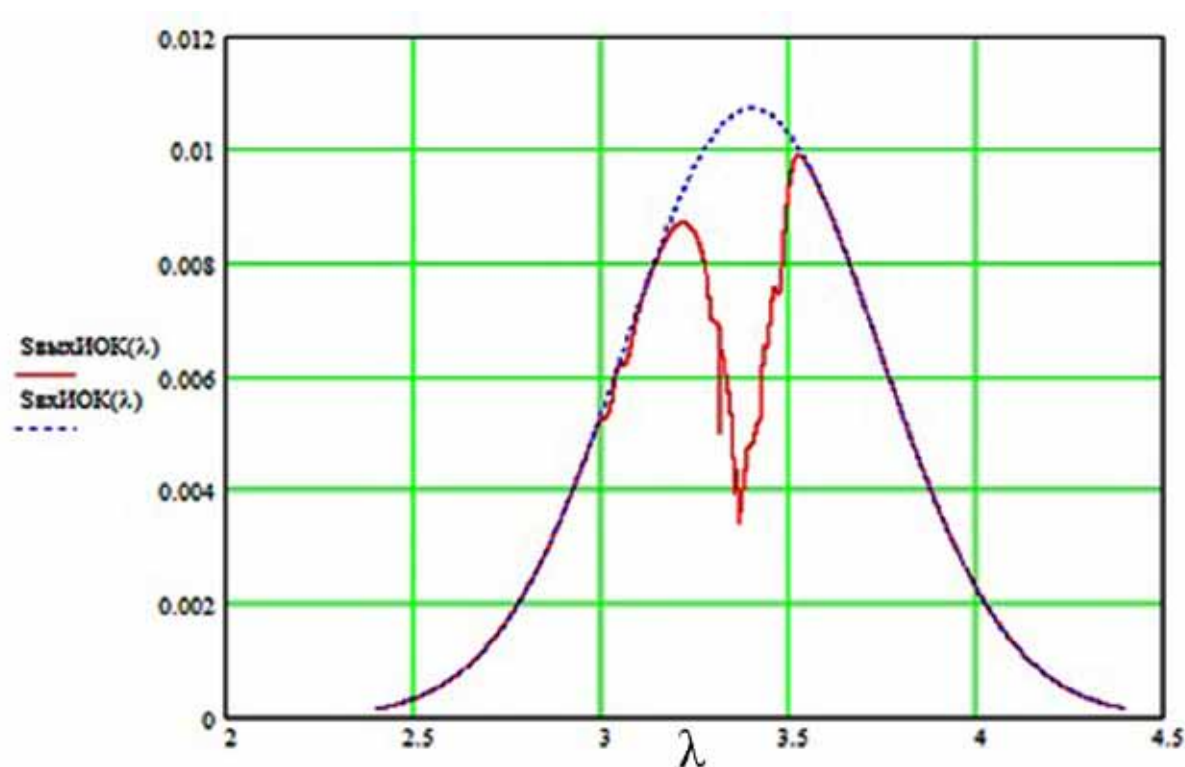


Рис. 8. Спектры входного и выходного сигналов оптического канала.

Заключение

В дальнейшем будет предложена структурная схема моделируемого измерительного канала, на базе которой будет создана принципиальная схема, проводится исследование дестабилизирующих факторов на процесс измерения концентрации суммы углеводородов. Основными дестабилизирующими факторами выступают температура и давление исследуемой газовой среды, нелинейность излучения через газовую среду, а также шумы в электронных компонентах измерительного канала.

Список литературы

1. Сигал И.Я. Защита воздушного бассейна при сжигании топлива. Л.: Недра, 1985.
2. Бегунов А.А., Конопелько Л.А. Физико-химические измерения состава и свойств веществ. М.: Изд-во стандартов, 1984.
3. Немец В.М. Спектральный анализ неорганических газов. М.: Химия, 1988.



БИОЛОГИЯ

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОЦЕНКИ УРОВНЯ ФИЗИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ НА ОРГАНИЗМ СПОРТСМЕНА-БАДМИНТОНИСТА

Бельская Л.В.

Омский госуниверситет им. Ф.М. Достоевского, Омск,
Ludab2005@mail.ru

Разработан способ лабораторной оценки уровня физической нагрузки на примере спортсмена-бадминтониста. Для этого определяют содержания Са и Р в слюне до и после физической нагрузки. При изменении их содержания до и после нагрузки более чем на 9.0 и 42.9%, соответственно, выявляют высокий уровень нагрузки; меньше 4.6 и 22.5 % – оптимальный уровень. Метод позволяет осуществить неинвазивную лабораторную диагностику уровня нагрузки.

Введение

Современная спортивная медицина помимо определения функционального состояния организма изучает отклонения, которые могут возникнуть вследствие неправильного, нерационального применения физических нагрузок и допуска к занятиям лиц с теми или иными дефектами здоровья. Основная причина негативного влияния физических нагрузок – недостаточное использование современных количественных методик, позволяющих обеспечить тщательный медицинский контроль в ходе тренировок, а также отсутствие оптимальных подходов к постнагрузочному восстановлению [3, 4, 6, 8]. Необходимые условия комплексного подхода к решению проблемы: учёт медицинских и биологических параметров, влияющих на особенности деятельности спортсмена; массовость обследования; неоднозначность критериев нормы и патологии для спортсменов.

Перечисленным условиям удовлетворяют методики, основанные на анализе слюны человека, поскольку она служит источником информации об общем состоянии организма. Очень важны исследования слюны в условиях физиологии полости рта для выявления интегрированных параметров, установления их критических значений для предупреждения патологических изменений. Имеющиеся методы функционально-диагностического обследования спортсменов сложны, трудоёмки и недостаточно информативны, требуют специально подготовленного медицинского персонала [2, 7]. Поэтому важен поиск простых, информативных методов экспресс-диагностики, основанных на анализе физико-химических параметров слюны. Цель работы – поиск неинвазивного способа лабораторного контроля уровня физической нагрузки на организм спортсмена для выявления уровня адаптированности и резервных возможностей организма, применимого для массовых исследований в условиях неоднозначности критериев нормы и патологии.

Материалы и методы

Материалом исследования была слюна спортсменов в возрасте от 18 до 32 лет. Слюну собирали в одинаковых условиях, не ранее чем через 2 ч. после приёма пищи и полоскания полости рта дистиллированной водой в стерильную пробирку с плотно закрывающейся крышкой. Сбор слюны проводили в состоянии покоя и после физической нагрузки. Собранную слюну центрифугировали в течение 10 мин. при скорости 3000 об/мин в лабораторной медицинской центрифуге ОПЛ-8. Для определения физико-химических параметров использовались методики, адаптированные в стоматологии для изучения ротовой жидкости [9]. Неорганический Р в слюне определяли по методу Больша и Льюка [1], для количественного определения белка использовали биуретовую реакцию [5]. Общую концентрацию Са в слюне определяли комплексонометрическим титрованием. Математическая обработка данных проводилась с помощью статистического пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft Inc. USA). Данные анализировали с помощью дискриминантного и кластерного анализов с использованием статистического пакета STATGRAPHICS Plus 5.0. Параллельно проводили функционально-диагностическое обследование спортсменов, учитывая следующие параметры: общие анкетные данные (пол, возраст, рост, вес, ИМТ); подготовленность (квалификацию, специфику и тип физической активности, отличие внутри группы, уровень нагрузок и биоэнергетических затрат).

Результаты и обсуждение

Как показывает практика, игровая деятельность бадминтониста протекает в следующем режиме [10]. Время на розыгрыш волана равно 5-9 с., иногда до 30-50 с. Время на подачи 7-10 с. Чистое игровое время в партии 3-6 мин. при 20-70 розыгрышах. В игровой день из 6 встреч число розыгрышей доходит до 420; чистое игровое время в ряде случаев 60-80 мин. Число ударов за это время достигает 4-4.5 тыс. Скорость обмена ударами 0.5-1.5 с. Частота сердечных сокращений в момент игры 130-195 уд. / мин. Выдержать такой жёсткий режим по силам только хорошо тренированному спортсмену.

Характер действий бадминтониста связан с аэробной и анаэробной выносливостью. В каждой партии организму приходится выдерживать нагрузки, близкие к максимальным, во время длительных розыгрышей волана, сопровождающихся быстрыми передвижениями по площадке и резкими изменениями скорости и направления движения. В лучшем положении оказывается спортсмен с развитой анаэробной выносливостью. В ходе исследования сформированы три группы спортсменов: (1) любители – 18 чел. (45 %), (2) мастера спорта (МС) – 8 чел. (20 %), (3) мастера спорта международного класса (МСМК) – 14 чел. (35 %). Спортсмены всех групп получали одинаковую физическую нагрузку: интервальная тренировка, смешанная аэробная и анаэробная нагрузка; продолжительность тренировки 90 мин. У спортсме-

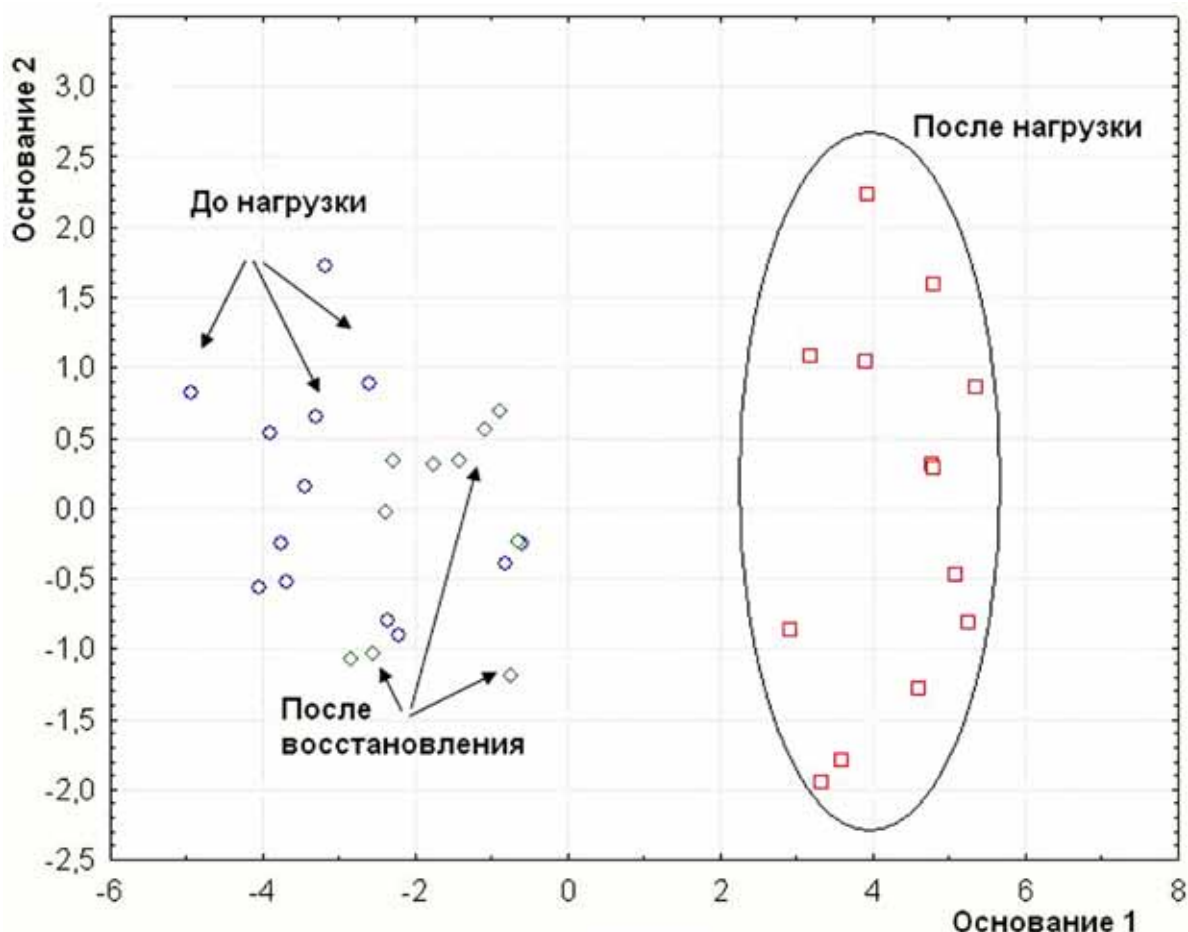


Рис. 1. Результаты дискриминантного анализа по группе спортсменов-бадминтонистов.

нов группы 3 после 3-часового отдыха и восстановления тренировку повторяли по той же схеме.

Предварительно массив экспериментальных данных обработали с использованием многомерных статистических методов (дискриминантный и кластерный анализы, Statistica 6.0, StatSoft). Наблюдается отличие параметров ротовой жидкости спортсменов-бадминтонистов всех групп до и после физической нагрузки, при этом параметры до нагрузки и после восстановления практически совпадают (рис. 1).

Анализ количественных характеристик состава слюны спортсменов МСМК выявил различия содержания определяемых компонентов до и после физической нагрузки. Общая концентрация Са закономерно уменьшается после нагрузки во всех образцах. При этом после 2-ой менее значительно, что говорит о равновесии в организме. Аналогично меняется Са/Р-коэффициент, показывающий общее состояние организма. После 1-ой нагрузки происходит увеличение концентрации Р-ионов. Результаты можно объяснить тем, что физическое напряжение увеличивает скорость обменных и энергетических процессов в организме, а именно: при интенсивной физической нагрузке увеличивается скорость и количество окисляемой АТК в мышечных волокнах. В результате окисления АТФ образуется ортофос-

формная кислота, выделяется большое количество энергии, расходуемой при нагрузке. Уменьшение концентрации Са объясняется его вымыванием в результате обезвоживания организма и участием в энергетических процессах. Так, образуя органические комплексы, он участвует в проведении нервного импульса в мышечных клетках, а часто является и катализатором энергетических процессов. Всё это нарушает электролитный состав организма, в том числе слюны, что сказывается на изменении Са/Р- коэффициента.

В этом случае после физической нагрузки спортсменам можно давать рекомендации по питанию, которое позволит восполнить запасы Са и / или Р непосредственно после тренировки. После 2-ой нагрузки происходит выравнивание содержания Р-ионов почти до первоначального уровня. Таким же образом меняется Са/Р-коэффициент. Это можно объяснить с биохимической точки зрения: образующаяся в результате окисления АТФ ортофосфорная кислота с течением небольшого времени регенерирует образование АТФ. В результате в организме наступает равновесие. Содержание белка до нагрузки – в пределах нормы, после нагрузок его содержание растёт, что связано с обезвоживанием организма в ходе тренировки (табл. 1-5).

Таблица 1. Параметры ротовой жидкости спортсменов группы 1 до и после физической нагрузки.

Показатель	Группа 1		Изменение параметра
	До нагрузки	После нагрузки	
Р, ммоль/л	2.21±0.57	2.01±0.50	-9.0%
Са, ммоль/л	3.05±0.49	1.44±0.30	-52.8%
Белок, мг/л	0.36±0.12	0.51±0.19	+29.4%
Са/Р	1.55±0.54	0.80±0.26	-48.3%

Таблица 2. Параметры ротовой жидкости спортсменов группы 2 до и после физической нагрузки.

Показатель	Группа 2		Изменение параметра
	До нагрузки	После нагрузки	
Р, ммоль/л	2.57±0.52	2.46±1.09	-4.3%
Са, ммоль/л	2.83±0.43	2.00±0.44	-29.3%
Белок, мг/л	0.46±0.11	0.70±0.11	+34.3%
Са/Р	1.12±0.20	0.87±0.26	-22.3%

Таблица 3. Изменение параметров ротовой жидкости спортсменов группы 3 после 1-й тренировки.

Показатель	До тренировки	После нагрузки 1	Изменение параметра
Р, ммоль/л	3.51±0.95	3.35±0.81	-4.6%
Са, ммоль/л	2.89±0.43	2.13±0.53	-26.3%
Белок, мг/л	0.32±0.12	0.26±0.11	-18.8%
Са/Р	0.97±0.24	0.73±0.25	-24.7%

Таблица 4. Изменение параметров ротовой жидкости спортсменов группы 3 между 1-й и 2-й тренировками.

Показатель	После нагрузки 1	После нагрузки 2	Изменение параметра
P, ммоль/л	3.35±0.81	3.19±0.91	-4.8%
Ca, ммоль/л	2.13±0.53	1.65±0.34	-22.5%
Белок, мг/л	0.26±0.11	0.27±0.12	+3.7%
Ca/P	0.73±0.25	0.61±0.19	-16.4%

Таблица 5. Общее изменение параметров ротовой жидкости спортсменов группы 3 после двух тренировок.

Показатель	До тренировки	После нагрузки 2	Изменение параметра
P, ммоль/л	3.51±0.95	3.19±0.91	-9.1%
Ca, ммоль/л	2.89±0.43	1.65±0.34	-42.9%
Белок, мг/л	0.32±0.12	0.27±0.12	-15.6%
Ca/P	0.97±0.24	0.61±0.19	-37.1%

Показано, что после физической нагрузки происходят существенные изменения состава слюны. В частности, уменьшается концентрация неорганического P и ионов Ca, увеличивается содержание белка. При этом происходит уменьшение соотношения Ca / P, которое характеризует равновесие процессов минерализации и деминерализации в ротовой полости человека. Это свидетельствует о нарушениях физиологического равновесия, вызванных высокой физической нагрузкой на организм. Изменения в ротовой жидкости спортсменов-профессионалов менее выражены, чем в группе любителей. По-видимому, это можно объяснить адаптацией организма к физическим нагрузкам.

Поскольку в условиях тренировочного процесса критерии нормы и патологии неоднозначны, дополнительно рассчитана степень изменения исследуемых параметров. Как видно из табл. 1-5, для группы бадминтонистов-любителей, не имеющих высокого уровня подготовленности, отклонения параметров ротовой жидкости от первоначальных значений (содержания Ca и P уменьшается на 9.0 и 52.8 %) наиболее существенны. Для профессионалов изменения параметров в 2 раза ниже (4.3 и 29.3 % для MC; 4.6 и 26.3 % для MСМК), что говорит о более высоком уровне их подготовленности. Наиболее удобны оценки изменения параметров ротовой жидкости по соотношению содержания Ca и P в ротовой жидкости до и после нагрузки. Изменения Ca/P для исследуемых групп составляет 48.3, 22.3 и 24.7 %.

При проведении двух последовательных тренировок тенденция изменения параметров ротовой жидкости сохраняется: 4.6 и 26.3 % после 1-й тренировки, 4.8 и 22.5 % после 2-й, тогда как суммарное изменение параметров составляет 9.1 и 42.9 % и приближается к соответствующим значениям для группы любителей (9.0 и 52.8 %). 3-часовой отдых между тренировками не

приводит к восстановлению параметров ротовой жидкости спортсменов до первоначальных значений. Это говорит о необходимости более длительного постнагрузочного восстановления и повышения адаптивных способностей организма спортсмена.

Таким образом, отклонение параметров ротовой жидкости от первоначальных значений можно использовать для лабораторного контроля уровня физической нагрузки для спортсменов-бадминтонистов. При изменении параметров на более чем 9.0 и 42.9 % выявляют высокий уровень нагрузки; при изменении параметров на менее чем 4.6 и 22.5 % выявляют оптимальный уровень нагрузки. Разработанный способ позволяет проводить лабораторную диагностику уровня физической нагрузки на организм человека с целью выявления уровня адаптированности и резервных возможностей организма, что применимо для массовых исследований в условиях неоднозначности критериев нормы и патологии.

Список литературы

1. Больц Д.М., Льюк Ч.Г. Колориметрические методы определения неметаллов. М.: Наука, 1963. 275 с.
2. Волков Н.И., Несен Э.Н., Осипенко А.А. и др. Биохимия мышечной деятельности. М.: Олимп. лит., 2000. 504 с.
3. Карпман В.Л., Белоцерковский З.Б., Гудков И.А. Тестирование в спортивной медицине. М.: Физ-ра и спорт, 1988. 208 с.
4. Коц Я.М. Спортивная физиология. М.: Наука, 1998. 2000 с.
5. Леус П.А. Клинико-экспериментальное исследование патогенеза, патогенетической консервативной терапии и профилактики кариеса зубов. Автореф. дисс. д-ра. мед. наук. М., 1977. 40 с.
6. Макарова Г.А. Спортивная медицина. М.: Сов. спорт, 2003. 480 с.
7. Михайлов С.С. Спортивная биохимия. М.: Сов. спорт, 2004. 220 с.
8. Павлов С. Е. Физиологические основы подготовки квалифицированных спортсменов. Уч. пособие для студентов ВУЗов физической культуры. М, 2010. 88 с.
9. Питаева А.Н., Коршунов А.П., Дистель В.А. и др. Физико-химические методы исследования смешанной слюны в клинической и экспериментальной стоматологии. Уч. пособие. Омск, 2001. 71 с.
10. Рыбаков Д. П., Штильман М. И. Основы спортивного бадминтона. М.: Физ-ра и спорт, 1982. 175 с.

ДИАГНОСТИКА СИНДРОМА ПЕРЕТРЕНИРОВАННОСТИ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ

Бельская Л.В.

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск,
Ludab2005@mail.ru

Проведено исследование состава слюны спортсменов до нагрузки, после нагрузки и после восстановления с целью контроля уровня физической нагрузки на организм. В исследование включены футболисты, теннисисты, волейболисты и пловцы. Показано, что суточное восстановление достаточно для восстановления водного баланса, но не достаточно для восстановления солевого баланса. Групповые отклонения в параметрах биологических жидкостей могут быть скорректированы назначением диеты или медицинских препаратов.

Введение

Один из наиболее сложных вопросов спортивной медицины – изыскание информативных тестов, способных адекватно отображать состояние спортсмена в динамике [6, 7, 10]. Другой – диагностика «синдрома перетренированности» [2, 16, 18]. Систематическое наблюдение за состоянием спортсменов с помощью стандартных медицинских тестов на сегодня – наиболее чувствительный метод выявления перетренированности. При использовании для диагностики именно слюны её свойства способствуют улучшению результатов. Сбор образцов может быть произведен в ходе тренировок и в периоды отдыха без медицинского персонала. Появляется возможность заменить еженедельные или ежемесячные профили на суточные.

Ранее на примере группы бадминтонистов разработана методика оценки уровня физической нагрузки на организм, заключающаяся в следующем. При изменении концентрации Са и Р в слюне более чем на 9.0 и 42.9 % выявляют высокий уровень нагрузки, менее чем на 4.6 и 22.5 % - оптимальный уровень [3]. Отклонение параметров от первоначальных можно использовать для лабораторного контроля уровня нагрузки для бадминтонистов. Цель этой работы – расширение области использования методики на другие виды спорта: футбол, теннис, волейбол и плавание.

Материалы и методы

Материалом исследования была слюна спортсменов в возрасте от 18 до 32 лет. Её собирали в одинаковых условиях, не ранее чем через 2 ч после приема пищи и полоскания полости рта водопроводной и дистиллированной водой в стерильную пробирку с плотно закрывающейся крышкой. Сбор проводили в состоянии покоя и после физической нагрузки. Собранную слюну центрифугировали в течение 10 мин. при скорости 3000 об. / мин. в

лабораторной медицинской центрифуге ОПЛ-8. Для определения физико-химических параметров использовались методики, адаптированные в стоматологии [11]. Неорганический Р определяли по методу Больца и Льюка [4], для определения белка использовали биуретовую реакцию [8]. Общую концентрацию Са определяли комплексонометрическим титрованием. Математическая обработка данных проводилась с помощью пакета STATISTICA 6.0 (StatSoft Inc. USA). Данные анализировали с помощью дискриминантного и кластерного анализов с использованием пакета STATGRAPHICS Plus 5.0. Параллельно проводили функционально-диагностическое обследование спортсменов. При этом учитывали: общие анкетные данные (пол, возраст, рост, вес, ИМТ); подготовленность (уровень квалификации, специфику и тип физической активности, отличие активности внутри группы, уровень нагрузок и биоэнергетических затрат).

Результаты и обсуждение

Футбол. Наиболее значимы факторами, определяющие уровень функционального состояния футболистов: эффективность метаболических процессов (факторный вес 18.7 %), мощность аэробного механизма энергообеспечения (15,9 %), скоростно-силовой потенциал мышц (13.0 %), уровень анаэробной работоспособности (9.4 %) и эффективность восстановления (9.0 %) [5, 13, 14]. Подобная факторная оценка требует комплексного медико-биологического обследования [9, 17]. В эксперименте принимали участие 10 футболистов, образцы слюны собирали трижды: до и после нагрузки, рано утром после сна (вне нагрузки).

Установлено повышенное содержание ионов Са во всех образцах (табл. 1). Их содержание в процессе тренировки значительно уменьшается, но после отдыха происходит восстановление. Уменьшение концентрации объясняется их вымыванием в результате обезвоживания организма и его непосредственным участием в энергетических процессах. Са, образуя органические комплексы, участвует в проведении нервного импульса в мышечных клетках, а зачастую является катализатором энергетических процессов.

Таблица 1. Параметры слюны футболистов до, после и вне физической нагрузки.

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Вне нагрузки
Са, ммоль/л	3.40±0.47	1.80±0.54	3.33±0.59
Р, ммоль/л	3.80±0.65	5.85±1.22	2.07±1.12
Са/Р	0.94±0.18	0.32±0.09	1.95±1.00
Белок, мг/л	0.43±0.08	0.57±0.13	0.42±0.16
рН	8.15±0.29	7.40±0.28	8.25±0.29

Концентрация неорганического Р в слюне футболистов в пределах нормы, но в ходе тренировки увеличивается. Изменение концентрации ионов

Са и Р в процессе тренировки оказывает влияние на Са/Р-коэффициент, который закономерно уменьшается после нагрузки во всех образцах.

Таблица 2. Степень изменения показателей слюны футболистов.

Показатель	До и после тренировки	До тренировки и после восстановления
Са, ммоль/л	-47.1%	-2.1%
Р, ммоль/л	+53.9%	-45.5%
Са/Р	-65.9%	+107.4%
Белок, мг/л	+32.6%	-2.3%
рН	-9.2%	+1.2%

Общая концентрация белка занижена у всех спортсменов на каждом этапе, но после тренировки происходит увеличение содержания, что вызвано общим обезвоживанием организма. Кислотность среды во всех образцах нормальная, но в процессе тренировки происходит подкисление. Результаты исследования основных параметров слюны, собранной утром на следующий день после тренировки, показали, что за ночь происходит их восстановление содержания до уровня, наблюдающегося перед тренировкой (рис. 1), кроме ионов Р.

Согласно рис. 1, параметры большинства образцов возвращаются к первоначальным значениям, но 2 образца существенно выбиваются из общей картины, что может свидетельствовать о недостаточно полноценном восстановлении организма после тренировки.

Волейбол. Характер игровой деятельности волейболиста обусловлен мгновенной сменой ситуации, кратковременные интервалы отдыха

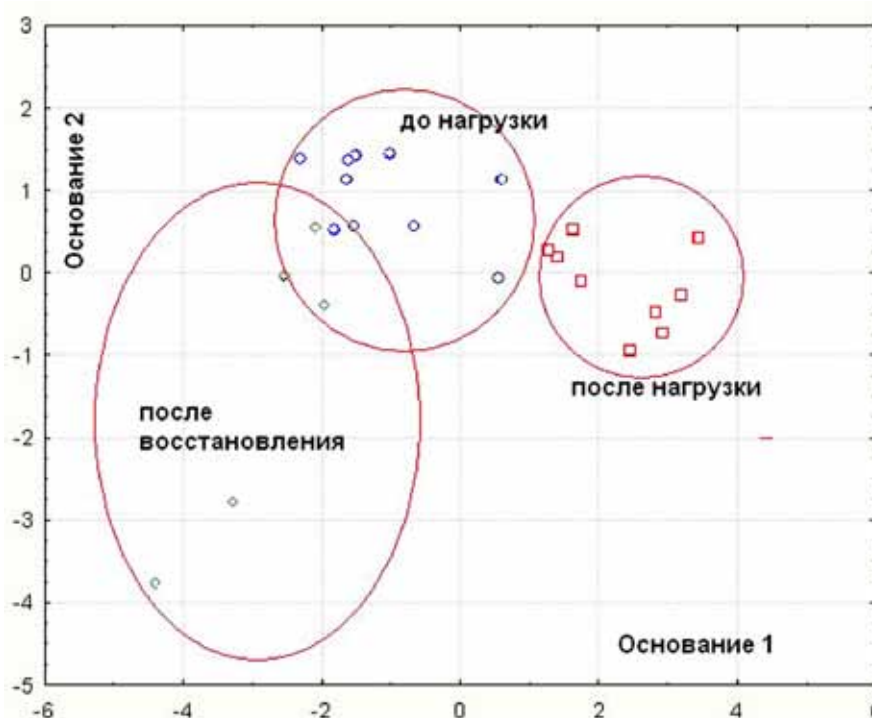


Рис. 1. Результаты дискриминантного анализа по группе футболистов.

(7-8 сек.) недостаточны для развертывания восстановительных процессов в организме. Специфика двигательной деятельности с переменной интенсивностью мышечных сокращений предопределяет значительные функциональные и морфологические изменения в деятельности анализаторов, опорно-двигательном аппарате и внутренних органах игрока.

Большой объем тренировочных и соревновательных нагрузок оказывает значительное физиологическое воздействие на функции внутренних органов (обмен веществ, кровообращение, дыхание, выделение и т.д.). Большие энергозатраты позволяют отнести нагрузки волейболистов к субмаксимальной мощности. Соревнования состоят из чередования активных фаз (8.7 сек.) с относительно кратковременными пассивными (7.1 сек.). За игру рабочая фаза повторяется 171-348 раз. Частота сердечных сокращений (ЧСС) достигает 180-200 уд. / мин. (средний показатель 153.2 уд. / мин.). Средние показатели потребления кислорода составляют 4.4 л. / мин., максимальная лёгочная вентиляция 1.0-7.5 л. / мин., величина вентиляционного эквивалента, характеризующая эффективность утилизации кислорода – 33.4. Средняя величина кислородного долга 8.9 л. Сопоставление этих показателей у волейболистов с аналогичными показателями в других видах спорта подчёркивает их невысокие величины. Вероятно, наибольшее значение для утомления имеют процессы, связанные с перенапряжением сенсорной сферы и наступлением торможения. Частые, хотя и краткие паузы характеризуют невысокий процент потребления кислорода (49 % максимальной аэробной производительности). В эксперименте приняли участие 13 волейболистов. Эксперимент повторяли дважды с интервалом в 1 неделю. Анализ характеристик слюны выявил достоверные различия содержаний компонентов на разных этапах тренировки: до и после нагрузки, после восстановления (табл. 3-5).

Таблица 3. Показатели ротовой жидкости групп волейболистов (1 неделя).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Ca, ммоль/л	3.08±0.31	1.42±0.31	-53.9%	2.70±0.25	-12.3%
P, ммоль/л	2.53±0.33	2.79±0.86	+10.3%	2.52±0.43	-0.4%
Ca/P	1.27±0.20	0.67±0.29	-47.2%	1.13±0.21	-11.0%
Белок, мг/л	0.32±0.02	0.48±0.02	+50.0%	0.35±0.03	+9.4%
pH	7.62±0.19	8.23±0.16	+8.0%	7.75±0.19	+1.7%

Таблица 4. То же (2 неделя).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Ca, ммоль/л	2.31±0.24	0.92±0.21	-60.2%	1.71±0.25	-26.0%
P, ммоль/л	2.80±0.32	2.67±0.82	+4.6%	2.82±0.65	+0.7%
Ca/P	0.83±0.07	0.45±0.16	-45.8%	0.64±0.22	-22.9%
Белок, мг/л	0.37±0.02	0.54±0.03	+45.9%	0.36±0.03	+2.7%
pH	7.73±0.16	8.31±0.16	+7.5%	7.71±0.35	-0.3%

Таблица 5. То же (среднее).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	2.69±0.22	1.17±0.19	-56.5%	2.29±0.30	-14.9%
Р, ммоль/л	2.66±0.20	2.73±0.51	+2.6%	2.66±0.34	+0%
Са/Р	1.05±0.12	0.56±0.15	-46.7%	0.93±0.19	-11.4%
Белок, мг/л	0.35±0.02	0.51±0.02	+45.7%	0.36±0.02	+2.9%
рН	7.67±0.11	8.27±0.10	+7.8%	7.74±0.16	+0.9%

Согласно табл. 3-5, в ходе тренировки содержание Са уменьшается в 2 раза (56.5 %), тогда как концентрация Р-ионов остается почти без изменений (+2.6 %). В результате обезвоживания концентрация белка увеличивается на 45.7 %. В процессе отдыха и восстановления происходит возвращение параметров ротовой жидкости к первоначальным значениям за исключением ионов Са. Закономерности подтверждены методами многомерной статистики (рис. 2-4). Видно, что параметры ротовой жидкости после физической нагрузки существенно отличаются от первоначальных. Постнагрузочное восстановление приводит к нормализации электролитного и белкового состава, что можно считать критерием оценки времени, необходимого для полноценного отдыха спортсмена.

Сравнение экспериментальных данных по группам футболистов и волейболистов позволило получить на диаграмме рассеяния канонических значений 3 группы, отличающихся по результатам анализов: две группы волейболистов (2 тренировки с интервалом в 1 неделю) и группу футболистов (рис. 5, 6). Результаты подтверждают возможность оценки физического состояния по параметрам слюны.

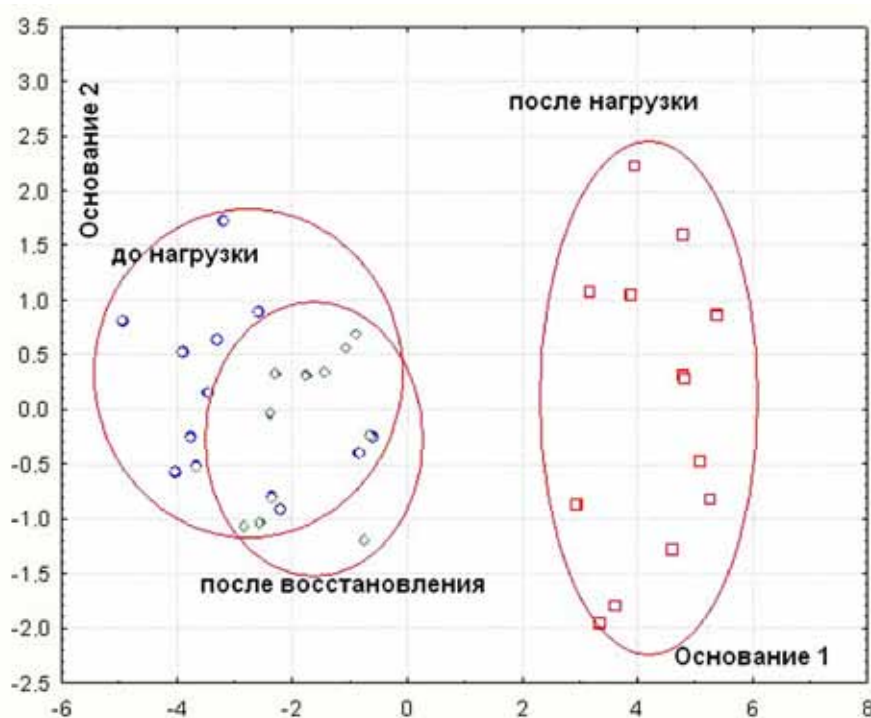


Рис. 2. Результаты дискриминантного анализа по группе волейболистов (1 неделя)

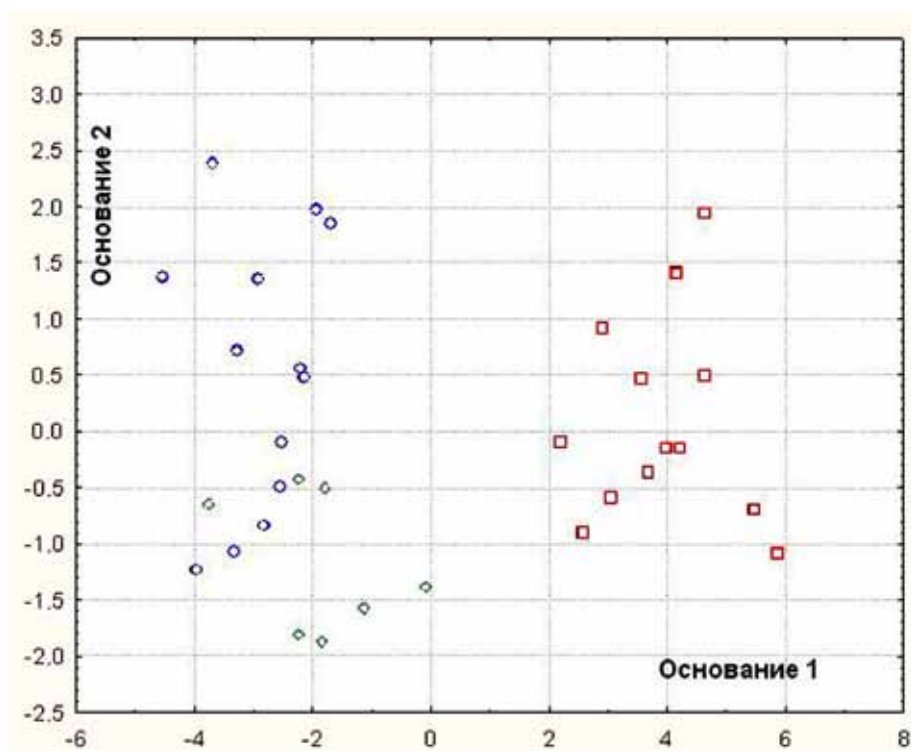


Рис. 3. То же (2 неделя).

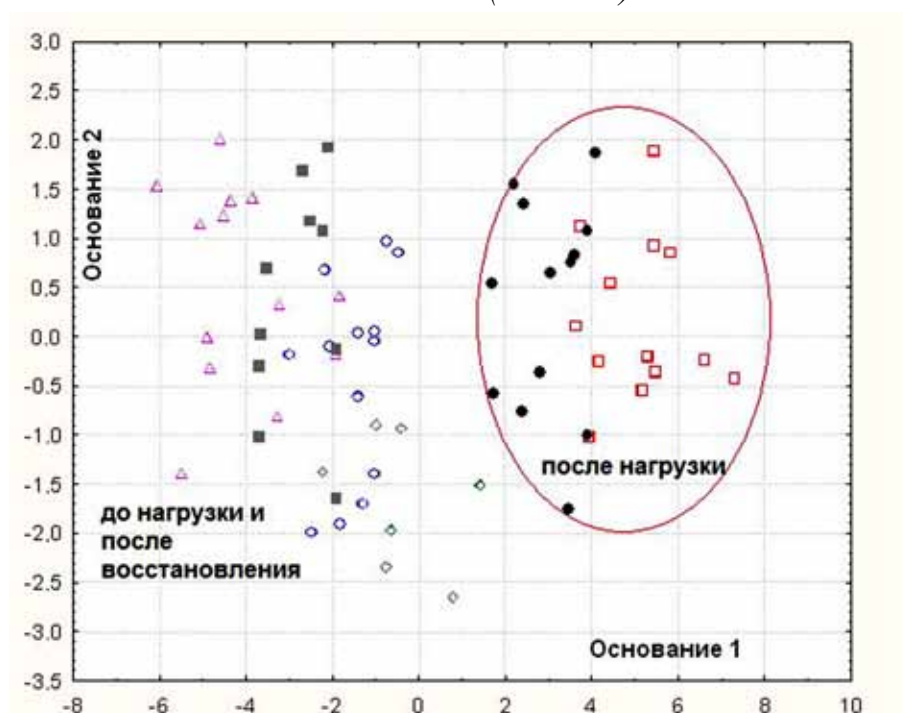


Рис. 4. То же (среднее).

Плавание. Достижение высоких спортивных результатов в плавании во многом определяется высоким уровнем энергообеспечения организма, а также способности реализовывать аэробные и анаэробные потенции на дистанции [1, 15]. Основой определения спортивной пригодности, разработки программ подготовки и контроля организма служат модельные и нормативные характеристики, допускающие количественный учёт показателей [12]: высокие значения уровней потребления кислорода, легочной вентиляции,

анаэробного порога. В эксперименте принимали участие 13 пловцов. Эксперимент повторяли трижды с периодичностью в 1 неделю. Анализ характеристик слюны выявил достоверные различия в содержаниях компонентов на разных этапах тренировки: до и после нагрузки, после восстановления (табл. 6-9).

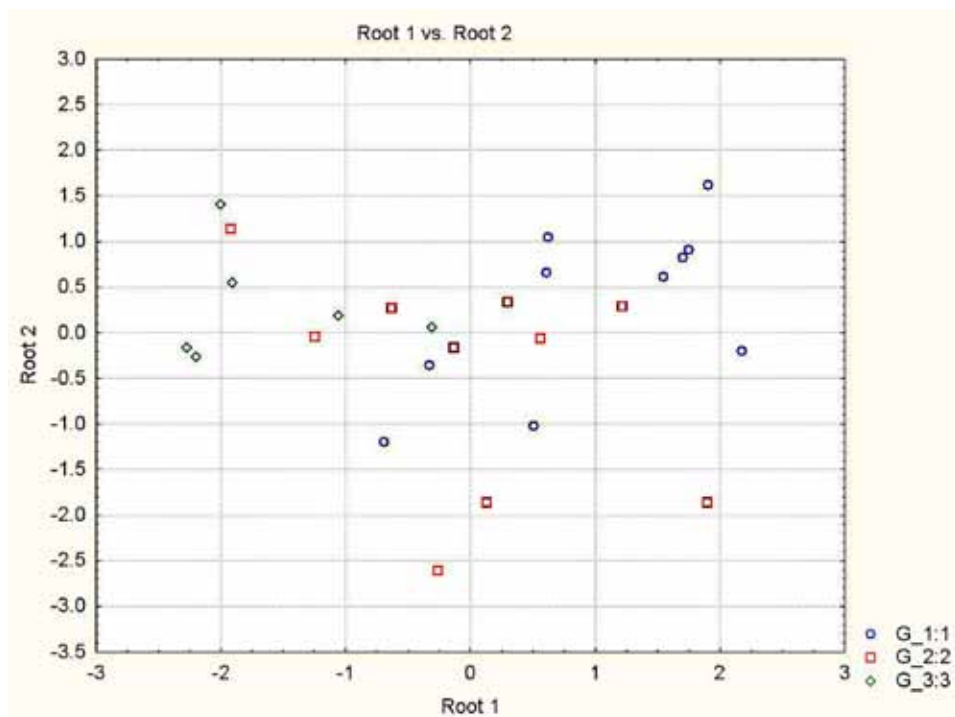


Рис. 5. Результаты дискриминантного анализа до нагрузки, волейболисты + футболисты.

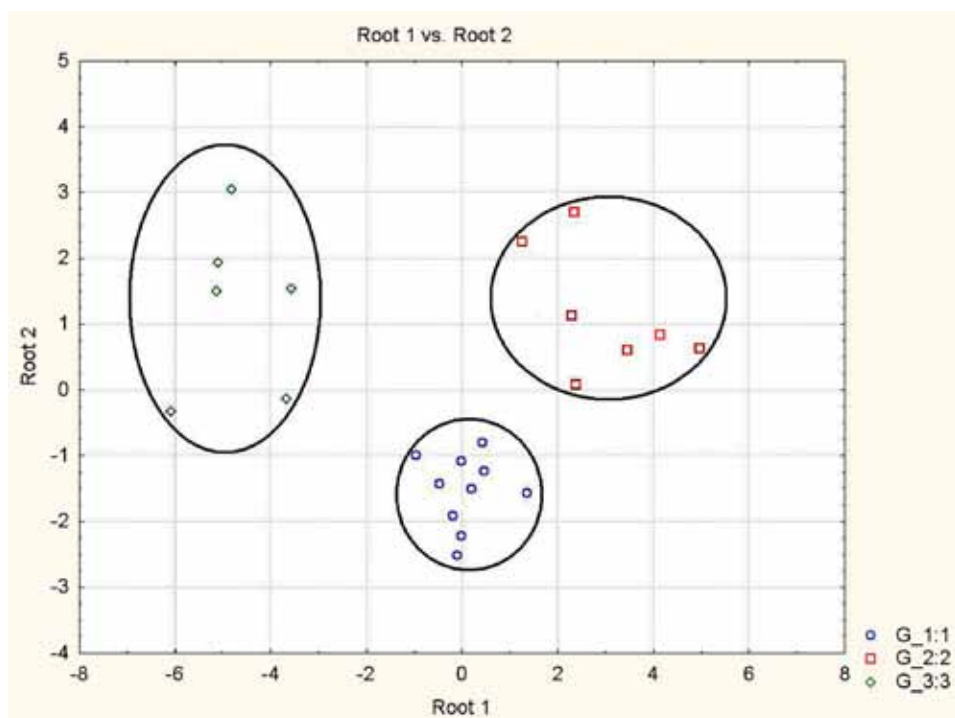


Рис. 6. То же после нагрузки: 1 – волейболисты 1; 2 – волейболисты 2; 3 – футболисты.

Таблица 6. Показатели слюны группы пловцов (1 неделя).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	4.35±1.24	2.50±0.71	-42.5%	4.21±1.37	-3.2%
Р, ммоль/л	1.48±0.23	2.58±0.26	+74.3%	1.59±0.38	+7.4%
Са/Р	2.97±0.80	0.97±0.27	-67.3%	3.02±1.22	+1.7%
Белок, мг/л	0.19±0.02	0.33±0.02	+73.7%	0.18±0.02	-5.3%
рН	7.35±0.74	7.94±0.41	+8.0%	7.50±0.50	+2.0%

Таблица 7. То же (2 неделя).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	3.65±1.03	2.01±0.58	-44.9%	3.79±1.18	+3.8%
Р, ммоль/л	1.38±0.51	2.35±0.69	+70.3%	1.61±0.61	+16.7%
Са/Р	4.54±3.38	1.11±0.62	-76.6%	3.09±1.80	-31.9%
Белок, мг/л	0.22±0.02	0.35±0.01	+59.1%	0.20±0.02	-9.1%
рН	7.90±0.37	8.25±0.25	+4.4%	7.86±0.21	-0.5%

Таблица 8. То же (3 неделя).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	3.00±0.94	1.11±0.46	-63.0%	2.78±0.70	-7.3%
Р, ммоль/л	2.08±0.24	3.09±0.22	+48.6%	2.34±0.25	+12.5%
Са/Р	1.44±0.39	0.37±0.16	-97.4%	1.21±0.30	-16.0%
Белок, мг/л	0.25±0.02	0.37±0.02	+48.0%	0.24±0.02	-4.0%
рН	8.33±0.24	8.42±0.19	+1.0%	8.20±0.28	-1.6%

Таблица 9. То же (среднее).

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	3.69±0.60	1.90±0.38	-48.5%	2.37±0.56	-35.8%
Р, ммоль/л	1.63±0.22	2.66±0.26	+63.0%	1.88±0.25	+15.3%
Са/Р	3.04±1.18	0.83±0.25	-72.7%	2.30±0.72	-24.3%
Белок, мг/л	0.22±0.01	0.35±0.01	+59.1%	0.21±0.01	-4.5%
рН	7.79±0.33	8.15±0.18	+4.6%	7.82±0.23	+0.2%

Для группы пловцов (табл. 9) отметим противоположное изменение параметров ротовой жидкости: уменьшение концентрации ионов Са (-48.5%) и увеличение содержания Р-ионов (+63.0%), причём после восстановления параметры не возвращаются к первоначальным, а остаются заниженными для Са (-35.8%) и завышенными для Р (+15.3%), что говорит о недостаточном восстановлении. Математическая обработка данных выявила, что достоверные различия основных показателей на разных тренировках наблюдаются после нагрузки. Разница в показателях до и вне нагрузки между разными

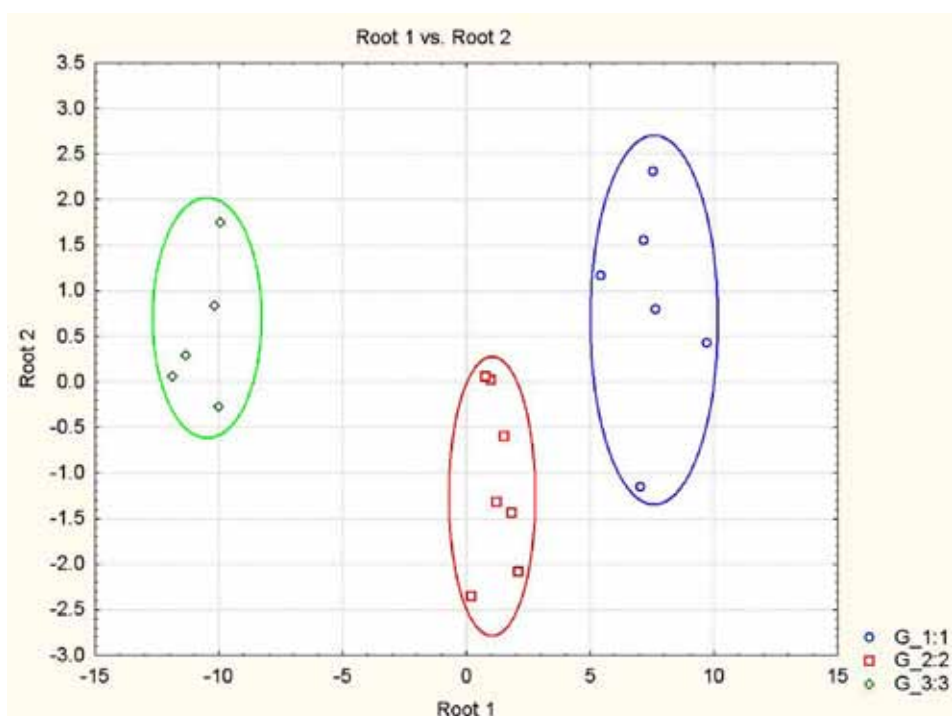


Рис. 7. Диаграмма рассеяния канонических значений по группе пловцов.

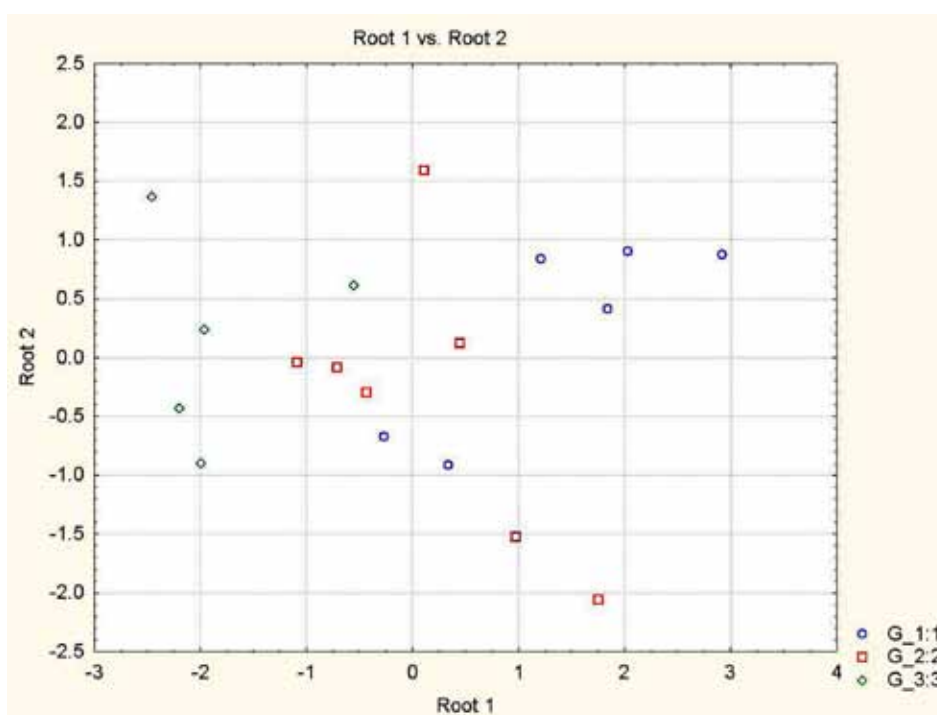


Рис. 8. То же: 1 – вне нагрузки 1; 2 – вне нагрузки 2; 3 – вне нагрузки 3.

тренировками математически не доказана. Выявлены отличия в содержании основных компонентов слюны у волейболистов и пловцов (рис. 5, 7, 8). Таким образом, результаты подтверждают гипотезу о возможности оценки физического состояния по параметрам ротовой жидкости.

Теннис. В эксперименте приняли участие 10 спортсменов. Результаты исследования химического состава и структурных свойств ротовой жидкости даны в табл. 10.

Таблица 10. Показатели ротовой жидкости группы теннисистов.

Показатель	До нагрузки	После нагрузки	Изменение параметра	После восстановления	Изменение параметра
Са, ммоль/л	2.38±0.48	1.38±0.48	-42.0%	3.17±0.29	+33.2%
Р, ммоль/л	1.75±0.21	3.29±0.38	+88.0%	1.98±0.18	+13.1%
Са/Р	1.36±0.17	0.43±0.21	-68.4%	1.61±0.11	+18.4%
Белок, мг/л	0.36±0.07	0.62±0.20	+72.2%	0.26±0.15	-27.8%
pH	8.00±0.41	7.13±0.48	-10.9%	8.17±0.29	+2.1%

Как видно, после тренировки существенно снижается содержание ионов Са (-42.0 %) и увеличивается концентрация Р-ионов (+88.0 %). Совокупное влияние этих параметров отражает коэффициент Са/Р, значение которого после тренировки уменьшается более чем в 2 раза (-68.4 %). Это говорит о значительном снижении минерализующих свойств ротовой жидкости. После отдыха значение параметров нормализуется, но наблюдается непропорциональное соотношение минеральной и белковой компонент, т.к. содержание минеральных соединений завышено (Са +33.2 %, Р +13.1 %), а белка – занижено (-27.8 %), в результате недостаточного восстановления резервных возможностей организма.

Сопоставление результатов по группам спортсменов

По результатам поведенных исследований составлена сводная таблица изменения параметров слюны спортсменов до и после тренировки, а также после отдыха и восстановления.

Таблица 11. Степень изменения параметров слюны после нагрузки.

Показатель	Плавание	Волейбол	Футбол	Бадминтон	Теннис
Са, ммоль/л	-48.5%	-56.5%	-47.1%	-41.7%	-42.0%
Р, ммоль/л	+63.0%	+2.6%	+53.9%	-6.1%	+88.0%
Са/Р	-72.7%	-46.7%	-65.9%	-35.9%	-68.4%
Белок, мг/л	+59.1%	+45.7%	+32.6%	+16.0%	+72.2%
pH	+4.6%	+7.8%	-9.2%	+7.8%	-10.9%

Таблица 12. То же после восстановления.

Показатель	Плавание	Волейбол	Футбол	Теннис
Са, ммоль/л	-35.8%	-14.9%	-2.1%	+33.2%
Р, ммоль/л	+15.3%	+0%	-45.5%	+13.1%
Са/Р	-24.3%	-11.4%	+107.4%	+18.4%
Белок, мг/л	-4.5%	+2.9%	-2.3%	-27.8%
pH	+0.2%	+0.9%	+1.2%	+2.1%

Для наглядного представления изменений удобно использовать лепестковые диаграммы (рис. 9-12). Из них видно, что после нагрузки содержание Са уменьшается во всех группах, в период восстановления концентрация

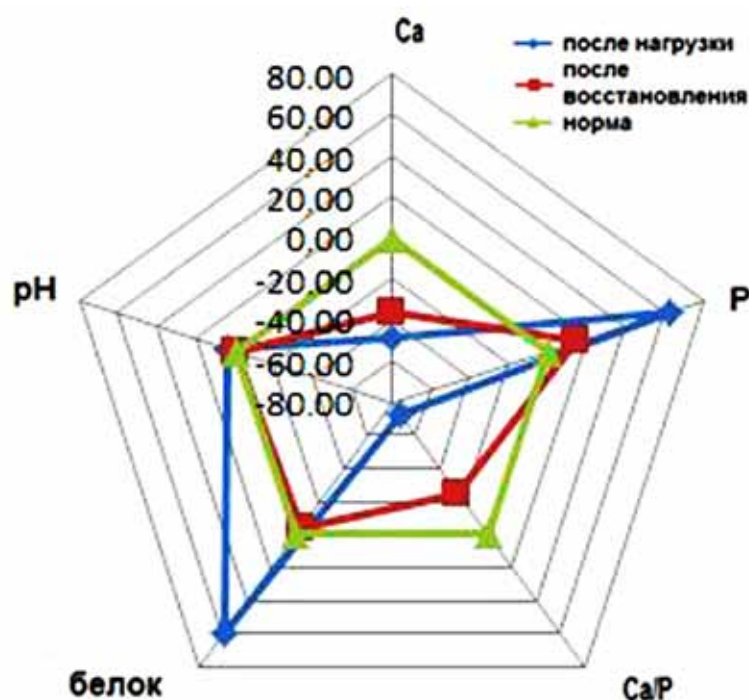


Рис. 9. Диаграмма изменения параметров ротовой жидкости в группе пловцов.

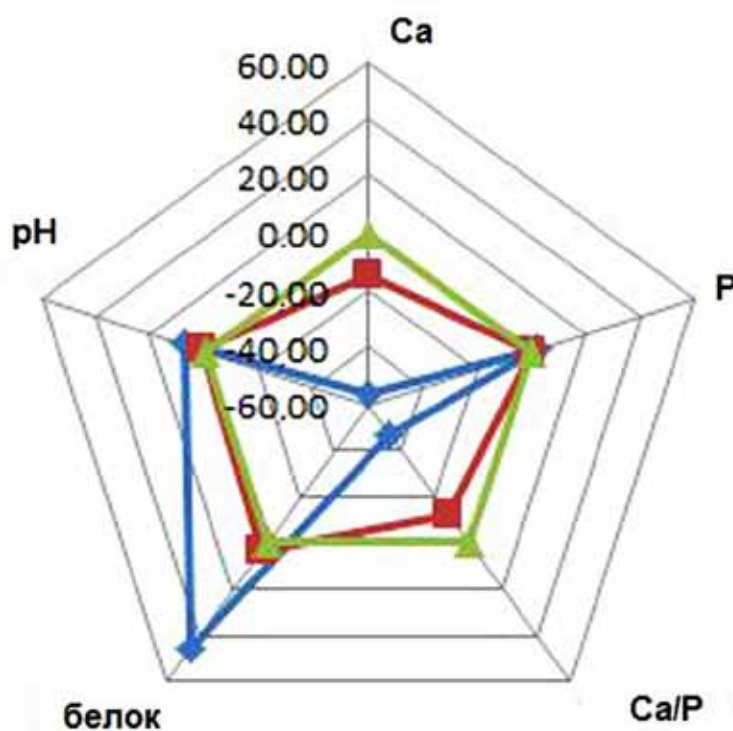


Рис. 10. То же в группе волейболистов.

ионов Ca стремится к первоначальному значению, но остаётся заниженной за исключением теннисистов (рис. 12). Обратная тенденция наблюдается для ионов P. После нагрузки их концентрация значительно возрастает во всех группах кроме волейболистов (рис. 10), а в период восстановления возвращается к исходной за исключением футболистов (рис. 11). Для всех групп после нагрузки повышается содержание белка, что связано с обезвоживанием организма. После суточного восстановления значения приходят в норму.

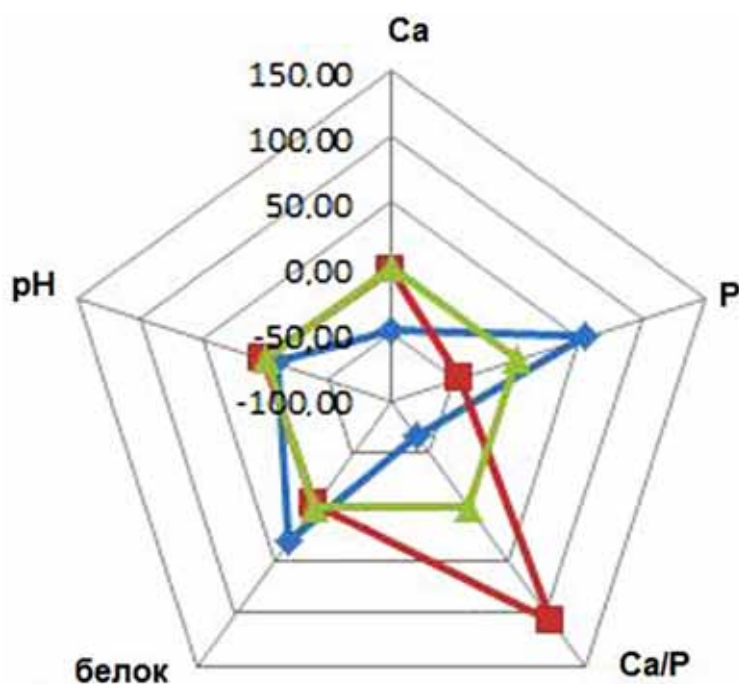


Рис. 11. То же в группе футболистов.

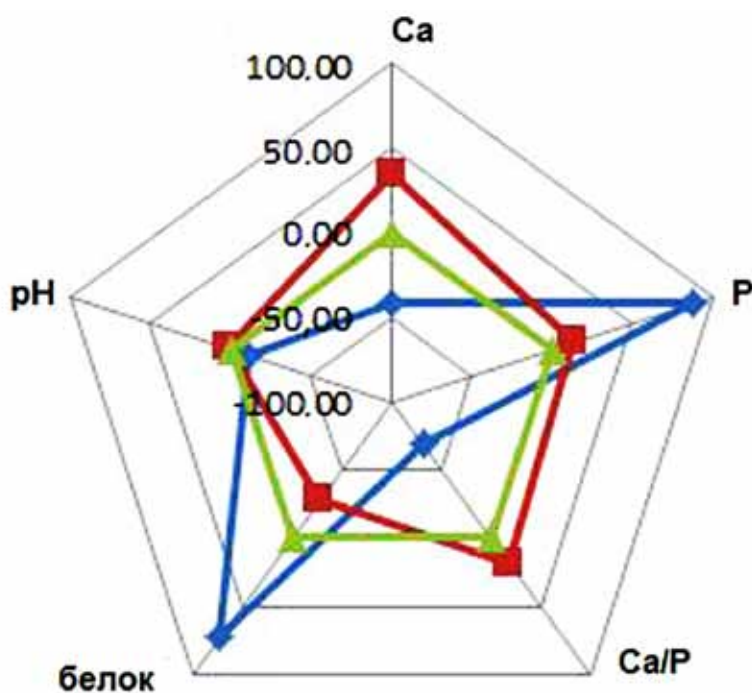


Рис. 12. То же в группе теннисистов.

Таким образом, суточное восстановление достаточно для восстановления водного баланса, но не достаточным для восстановления солевого баланса в организме. Групповые отклонения в параметрах биологических жидкостей могут быть скорректированы назначениями диеты или медицинских препаратов.

Список литературы

1. Абсалямов Т.М. Научные основы планирования и управления подготовкой пловцов. М.: Физ-ра и спорт, 1983. С. 3-21.

2. Афанасьева И.А. Изучение патогенетической роли различных иммунофизиологических факторов в развитии состояния перетренированности с помощью метода корреляционных плеяд // Уч. зап. ун-та им. П.Ф. Лесгафта. 2007. № 12(34). С. 13-22.
3. Бельская Л.В. и др. Перспективы использования результатов анализа слюны при планировании тренировочного режима спортсменов // Омский научн. вестник. 2011. № 6(102). С. 175-178.
4. Больц Д.М., Льюк Ч.Г. Колориметрические методы определения неметаллов. М., 1963. 275 с.
5. Годик М.А. Физическая подготовка футболиста. М.: Олимпия Пресс, 2006. 272 с.
6. Граевская Н.Д., Долматова Т.И. Спортивная медицина. М.: Сов. спорт, 2004. 304 с.
7. Граевская Н.Д., Долматова Т.И., Калугина Г.Е. и др. К вопросу об унификации оценки функционального состояния спортсменов // Теория и практика физической культуры. 1995. № 2. С. 11-15.
8. Леус П.А. Клинико-экспериментальное исследование патогенеза, патогенетической консервативной терапии и профилактики кариеса зубов. Автореф. дис. д-ра мед. наук. М., 1977. 40 с.
9. Макарова Г.А и др. О принципах оценки медико-биологических критериев функционального состояния организма спортсменов // Теория и практика физической культуры. 1991. № 12. С. 8-10.
10. Перхунов А.М. Очерки донозологической функциональной диагностики в спорте. М.: РАСМИРБИ, 2006. 152 с.
11. Питаева А.Н., Коршунов А.П., Дистель В.А. и др. Физико-химические методы исследования смешанной слюны в клинической и экспериментальной стоматологии: учебное пособие. Омск, 2001. 71 с.
12. Плавание. Ред. В.Н. Платонов. Киев: Олимп. лит-ра, 2000. 431 с.
13. Пшибыльский В., Ястжембский З. Физическая подготовленность квалифицированных футболистов различных игровых амплуа // Теория и практика физ. Культуры. 2003. № 3. С. 52-55.
14. Семаева Г.Н., Квашук П.В. Интегральная оценка функционального состояния футболистов высокой квалификации // Вестник спорт. Науки. 2005. № 2(7). С. 12-20.
15. Соломатин В.Р. Модельные характеристики и нормативные требования специальной работоспособности высококвалифицированных пловцов // Вестник спорт. Науки. 2009. № 3. С. 17-20.
16. Уилмор Дж., Костилл Д. Физиология спорта и двигательной активности. К.: Олимп. лит-ра, 1997. 504 с.
17. Физиологическое тестирование спортсмена высокого класса. Ред. Дж.Д. Мак-Дугалл и др. Киев: Олимп. лит-ра, 1998. 432 с.
18. Шлепцова В.А. и др. Оценка иммунного статуса спортсменов на разных этапах тренировочного процесса // Вестник спорт. Науки. 2006. № 3. С. 23-28.

ОБ АНАЛИЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПОЗИЦИЙ ТЕОРИИ СИММЕТРИИ

Беляев О.А.

Московский госуниверситет им. М.В. Ломоносова, Москва

Более 200 лет назад Лаплас высказал предположение, что любая задача естествознания может быть решена, если мы знаем положения и импульсы частиц, составляющих систему в начальный момент времени. Но развитие наук вынудило оставить мечту о лапласовском рае. Нереальность такой постановки вопроса может ощутить каждый студент, пытающийся освоить решение задачи двух тел и узнающий о бесперспективности её аналитического решения в общей постановке. Прогресс в решении таких задач достигнут за счёт численных методов и вычислительной техники. Согласно закону Мора, тактовые частоты центральных процессоров (с учётом числа вычислительных «ядер»), объёмы оперативной памяти и жёстких дисков современных компьютеров удваиваются каждые два года. Тем не менее, по-прежнему: реально лишь приближённо рассчитать краткосрочное поведение модельного ансамбля из небольшого (скажем, по сравнению с числом Авогадро) числа частиц; есть проблемы сильной зависимости от начальных условий, например, в случае турбулентных течений газа или жидкости, а также прочих хаотических систем; имеют место трудности анализа и интерпретации больших массивов численных данных и т.д. Эти факты говорят в пользу методов качественного анализа сложных систем, например, биологических. Мощным и эффективным формализмом может служить теория симметрии [2], изучающая способность различных объектов оставаться неизменными при различных преобразованиях.

Рассмотрим 8 положительных (или отрицательных) зарядов в вершинах куба в отсутствие внешних полей. В некоторый момент времени они одновременно отпускаются. Без упрощающих предположений вычисление координат каждого заряда в зависимости от времени чрезвычайно сложно. Каждый заряд ощущает действие остальных с запаздыванием, т.к. электромагнитное взаимодействие распространяется со скоростью света. Происходит непрерывная потеря энергии в пространство за счёт излучения ускоренно движущимися зарядами и т.д. [1]. Соображения симметрии позволяют легко найти траектории всех зарядов – они будут двигаться, оставаясь в вершинах куба.

Сохранение симметрии можно понять на основе следующих аргументов. Назовём внутренним, или спонтанным свойством физической системы такое, которым она обладает независимо от воздействий извне. Пример – порождение зарядом электрического поля. Количественно оно измеряется посредством тензорного (в частности, скалярного или векторного) поля, когда в каждой точке пространства заданы компоненты тензора (скаляра или вектора). Поле

характеризуется симметрией, понимаемой следующим образом. Преобразование пространства является операцией симметрии поля, если оно остаётся инвариантным, т.е. если значения компонент тензора в каждой точке пространства не изменяются. Преобразования симметрии оставляют инвариантными все физические свойства системы, т.е. группа симметрии системы является подгруппой группы симметрии любого её спонтанного свойства. Это утверждение сформулировано П. Кюри как обобщение большого числа эмпирических наблюдений физических свойств кристаллов ¹. Оно может быть строго доказано для модельных систем наподобие рассмотренной в приведённом примере. Ситуация с принципом Кюри аналогична ситуации с эргодичностью. При анализе статистических систем мы можем предполагать равенство средних значений по времени средним значениям по ансамблю.

Для систем, помещённых во внешние силовые поля, принцип Кюри можно обобщить: под влиянием извне система может понизить симметрию, но не ниже пересечения группы симметрии до воздействия и группы симметрии поля воздействия. Хотя приведённый пример с равными точечными зарядами может показаться надуманным, многие реальные системы могут быть описаны при помощи модельных систем с фундаментальными центральными взаимодействиями. Что до применимости принципов Кюри, они справедливы практически для всех классических систем. Но если бы они были универсальными, то мир стремился бы к сферической симметрии. Этому препятствуют макроскопические следствия микроскопического феномена спонтанного нарушения симметрии, когда в результате изменения конфигурации системы симметрия понижается, но симметрия гамильтониана остаётся инвариантной относительно более высокой группы симметрии [3]. Макроскопически спонтанное нарушение симметрии проявляется в физике конденсированного состояния при возникновении ферромагнетизма и сегнетоэлектрических фазовых переходах, а также в слое жидкости при возникновении конвекционных ячеек.

Симметричные соображения давно применяются на интуитивном уровне в биологии. Так, неблагоприятные факторы внешней среды оказывают негативное воздействие на человека, вызывая диффузные поражения парных органов (лёгкие, почки). В каждом из них повышается вероятность мутаций, ведущих к возникновению опухоли. Практически невероятно, что процесс начнётся сразу в двух органах. В итоге очаговые и диффузные поражения парных внутренних органов различаются по симметричным параметрам. Очаговые процессы можно классифицировать по симметрии, раз-

¹ П. Кюри описывал эту ситуацию при помощи следующей терминологии. Физическую систему он рассматривал в этом контексте как причину своих физических свойств и утверждал, что симметрия причины содержится в симметрии следствия. В логически эквивалентной форме: физическое явление не может иметь диссимметрию, отсутствующую в причине.



Рис. 1. Меланома – злое кожное новообразование.

ные аспекты которой в случае кожных заболеваний могут играть важную роль в начальной диагностике.

Меланома (рис. 1), рост которой связан с нарушением естественного контроля деления клеток, отличается от доброкачественных родимых пятен, веснушек и т.д. несимметричной формой, неровными краями и неравномерностью окраски. Симметричные закономерности проявляются не только на уровне онтогенеза, т.е. индивидуального развития отдельных организмов, но и филогенеза, в эволюции биологических видов на протяжении миллионов лет.

Многие неподвижные или малоподвижные морские организмы, испытывающие одинаковое воздействие

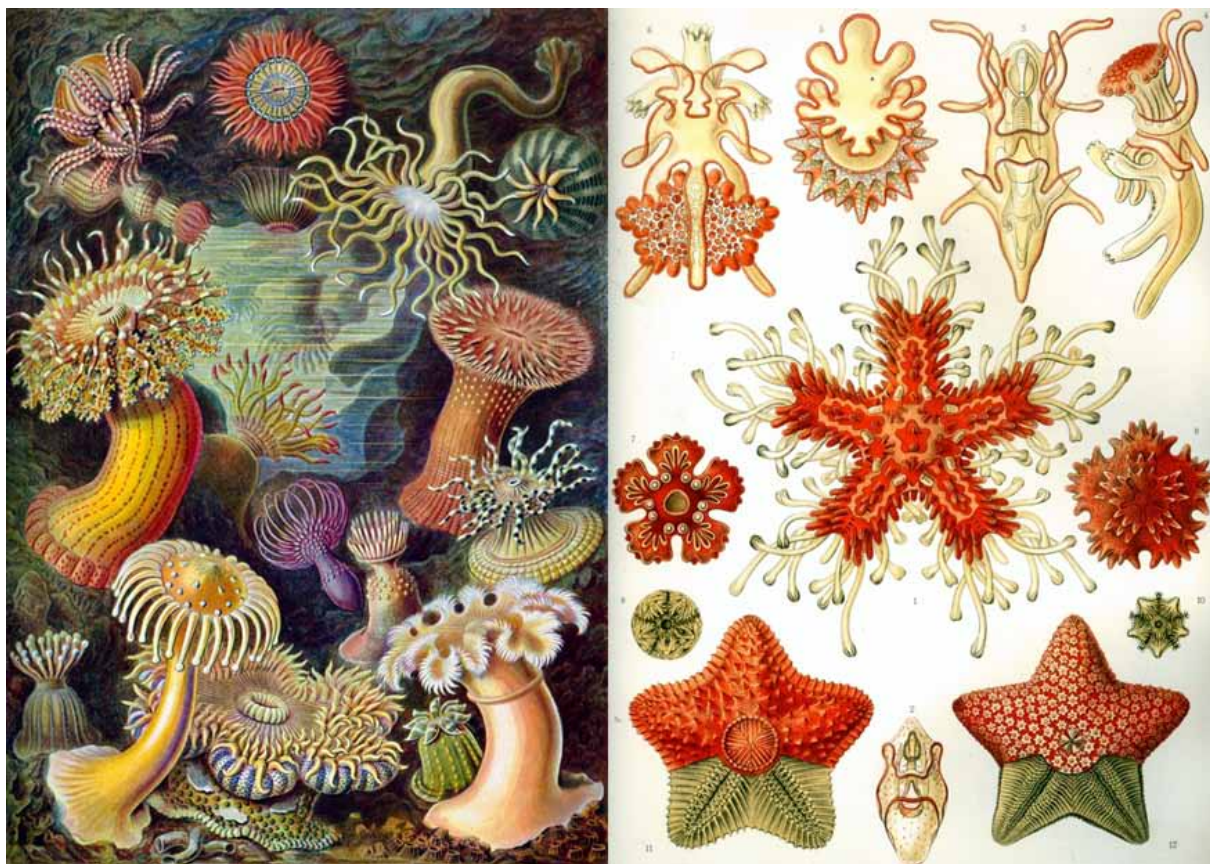


Рис. 2. Симметрия актиний и морских звёзд (из книги Э. Геккеля «Kunstformen der Natur»).

воды с разных сторон, обладают радиальной симметрией (рис. 2). Но по мере увеличения подвижности и выхода на сушу в ходе эволюции происходит цефализация организмов – выделение управляющего и организующего центра в форме головного мозга. В результате осуществляется переход к билатеральной симметрии с эквивалентностью левой и правой половин тела у высокоорганизованных существ. У них во взаимодействии с окружающим миром направления вперёд и назад, вверх и вниз не эквивалентны в силу направленности их движения и гравитации.

Таким образом, методы симметричного анализа (например, основанные на принципе Кюри) позволяют лучше понять устройство отдельных организмов и биологическую эволюцию в целом.

Список литературы

1. Окунь Л.Б. Физика элементарных частиц. М.: Наука, 1988.
2. Шубников А.В., Копчик В.А. Симметрия в науке и искусстве. М.: Наука, 1972.
3. Griffiths D.J. Introduction to Electrodynamics. New Jersey: Prentice-Hall, 1989.

ФОТОРЕПОРТАЖ

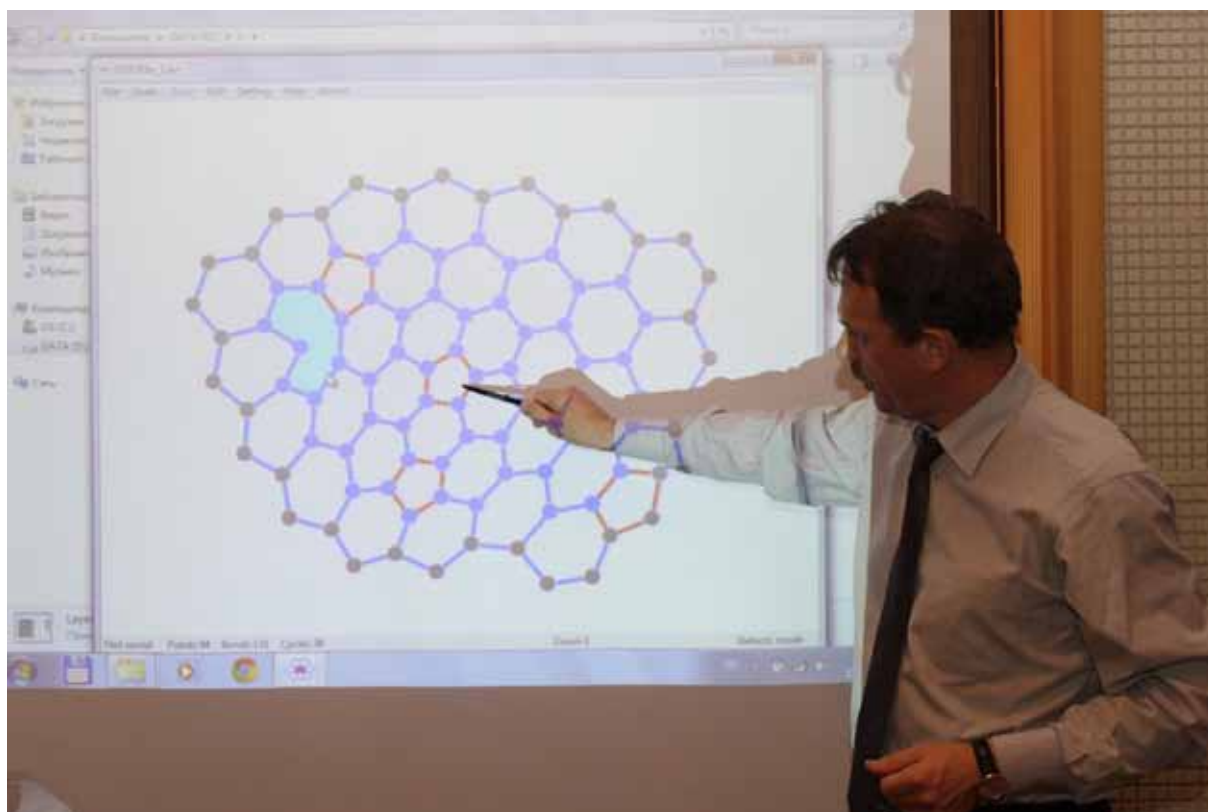






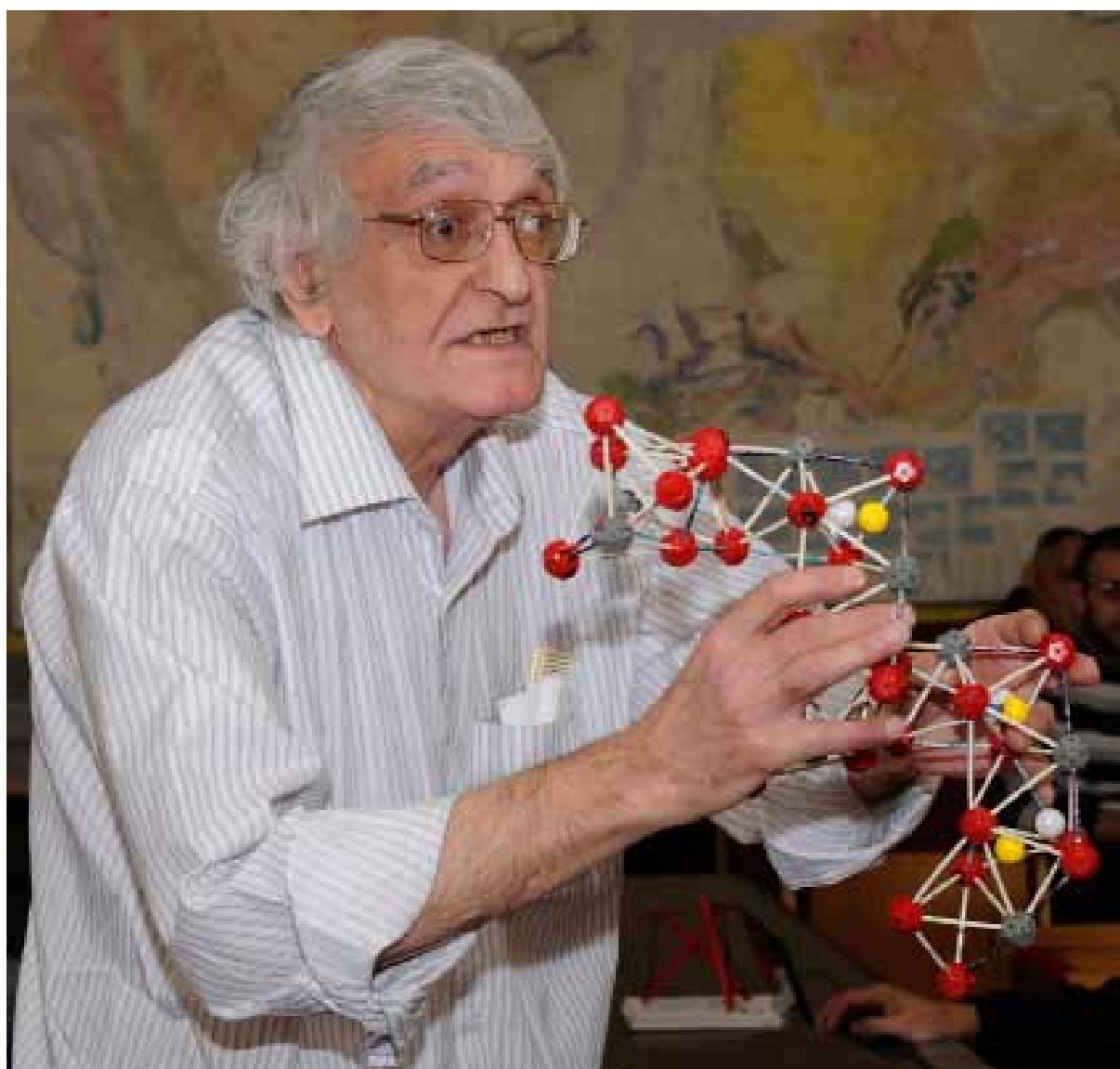




















ПРЕССА



Сто страниц умных мыслей

Елизавета Колесова

АПАТИТЫ

Глядя на растущий цветок или летящую птицу, простой человек довольствуется эстетической стороной увиденного. Но учёные – люди иного рода. Особенно те, кто рассматривает естественные науки через призму математики.

Чтобы докопаться до сути происходящего, постичь природную гармонию, они призывают на помощь формулы, с их помощью опишут весь процесс, все изменения и тем самым уловят существующие в природе связи и закономерности. Дело это трудное, но энтузиасты находят всегда. Яркий пример тому – ежегодные конференции Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках», которые больше десяти лет проходят в Геологическом институте КНЦ РАН. Здесь собираются единомышленники: делятся работками и результатами, ведут научные споры и находят новые направления для исследований.

В этом году свои доклады представили 11 учёных из Кольского научного центра,



■ Для наглядности при объяснении симметричных основ строения альфа-спирали Александр Талис использует различные модели

Москвы, Санкт-Петербурга. Многие из них – участники со стажем. Школа пользуется популярностью не только у кандидатов наук, но и молодых учёных.

– Я всегда очень радуюсь, когда на наших встречах появляется молодёжь, – говорит директор Геологического института идейный вдохновитель и организатор школы **Юрий Войтеховский**, – появляются и становятся постоянными участниками. На моей памяти уже несколько молодых учёных прошли путь от аспирантов до кандидатов наук. Хочется верить, что в их профессиональном росте помогла и наша школа.

Научные изыскания этого года можно разделить на два направления – минерало-кристаллографический и «вольное творчество», которое представлено в секции «Разное». Её темы разнообразны и не ограничены строгими рамками, поэтому в разные годы здесь появлялись доклады, посвящённые посадке искусственного спутника на Луну или вихрям в атмосфере Венеры. Такая свобода научных изысканий вполне оправдана. Организаторы надеются, что она станет залогом зарождения новых направлений исследовательской работы.

– Обычно по итогам работы школы мы выпуска-

ем сборник трудов наших участников, причём как очного, так и заочного этапов конференции, – рассказывает Юрий Войтеховский. – Томик получается страниц на сто. Этот год не станет исключением даже несмотря на то, что сегодня Академия наук переживает не самые лёгкие времена. Например, этой осенью наша школа впервые за историю своего существования не получила поддержки из Москвы. Нам попросту было не к кому обращаться за помощью: свою деятельность прекратила комиссия РАН по работе с молодёжью. Федеральному агентству научных организаций тоже пока не до нас: идёт ломка фундаментальной науки России, её академической системы, многое упускается. Да что там говорить, Геологический институт, под крылом которого проходят конференции математиков от естественных наук, не получил денег на летние экспедиции: в Москве забыли, что геологам необходимо куда-то выезжать.

Чем завершится реконструкция системы РАН, наши учёные прогнозировать не берутся, говорят, мол, большое видится на расстоянии. Хочется верить, что изменения в итоге пойдут российской науке на пользу, а не во вред, но это покажет только время.

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие редактора	3
---------------------------------	---

МАТЕМАТИКА И КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Бобков А.И. Опыт математического исследования отношений объектов нижних уровней организации материи	5-16
Войтеховский Ю.Л. Комбинация простых форм как алгебраическая полуструктура	17-19
Ковалёв М.Д. Жёсткость и изгибаемость многогранников и шарнирных конструкций.	20-30
Раменская М.Е. О строении бинарных кристаллических структур в виде двух бирадиальных упаковок, сопряженных через длину связи	31-40
Степенщиков Д.Г. Структурные деформации фуллеренов и графена: обзор методов изучения	41-47
Страшненко Г.И. Теоретическое обоснование интегрального количественного показателя формы кристалла.	48-120
Статья 1. Расчет F-функции для кристаллов кубической сингонии	48-53
Статья 2. Расчет F-функции переменных форм кубической сингонии	53-69
Статья 3. Расчет F-функции комбинации двух постоянных форм кубической сингонии.	69-76
Статья 4. Расчет F-функции комбинаций с участием переменных форм кубической сингонии	76-108
Статья 5. Расчет F-функции тройных комбинаций простых форм кубической сингонии	108-120
Талис А.Л. Топологически устойчивая минимальная поверхность, политопы с симметрией группы коксетера F_4 и модели биополимеров.	121-134
Талис А.Л., Крапошин В.С. Симметричные основы образования кристаллических сростков в металлургических расплавах.	134-146
Шутов А.В., Коломейкина Е.В. О числе решетчатых разбиений плоскости на полимино заданной площади	147-152
Шутов А.В., Малеев А.В. Разбиение пенроуза – модель квазикристаллов	152-161

ГЕОЛОГИЯ И ГЕОФИЗИКА

Войтеховский Ю.Л. Баланс химических элементов в горных породах и рудах	163-173
ПРИЛОЖЕНИЕ	173-180
Войтеховский Ю.Л. К новой парадигме петрографии	181-186
Гульбин Ю.Л. Моделирование P – T – t трендов ставролитсодержащих пород Северного Приладожья на базе одномерного уравнения теплопроводности	187-197
Денисова Ю. В. Zr-Hf отношение акцессорного циркона Бадьянского массива, Приполярный Урал.	198-203
Дёмин В.И., Волков А.В. Восстановление природных условий XIX-XX вв. по климатически неоднородным рядам (на примере Хибин).	204-219
Ильченко В.Л. Геотектоника и эволюция земной поверхности . .	220-228
Петров Т.Г. Геотектоника и эволюция земной поверхности	229-237
Пушкин А.А., Леонтьев М.А., Римкевич В.С. Зона протекания гетерофазных физико-химических реакций	238-242
Пчёлкин В.В. Теория распознавания образов как альтернативная методическая основа изучения шумановских резонансов	243-247
Слуковский З.И. Природный и техногенный статус микроэлементов в тонкой фракции речных донных отложений урбанизированной среды	248-251
Трунов В.А., Хламов М.Г. Моделирование аналитического сигнала концентрации углеводородов в выхлопах автомобильного транспорта.	252-257

БИОЛОГИЯ

Бельская Л.В. Разработка методики оценки уровня физической нагрузки на организм спортсмена-бадминтониста	259-264
Бельская Л.В. Диагностика синдрома перетренированности на основе данных математической статистики	265-277
Беляев О.А. Об анализе биологических систем с позиций теории симметрии.	278-281
ФОТОРЕПОРТАЖ	283-294
ПРЕССА	295

*Труды XI Всероссийской
(с международным участием) научной школы
“Математические исследования
в естественных науках”*

Апатиты, 11-12 ноября 2014 г.

Отпечатано в ЗАО “К & М”

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

Тираж 100 экз.

