

## Теория строения икосаэдрических квазикристаллов: типы упаковок

© А.Е. Мадисон,<sup>1</sup> П.А. Мадисон<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский университет „Высшая школа экономики“,  
190121 Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“,  
197022 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: alex\_madison@mail.ru

Поступило в Редакцию 8 сентября 2024 г.

В окончательной редакции 20 ноября 2024 г.

Принято к публикации 29 ноября 2024 г.

Предложена единая теория строения икосаэдрических квазикристаллов. Проанализированы все возможные варианты самоподобных икосаэдрических упаковок. К ним относятся три типа квазирешеток ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ), являющихся аналогами примитивной, объемно-центрированной и гранецентрированной кубических решеток; центросимметричные и нецентросимметричные. Полностью формализованы правила подстановок для разбиений  $I$ - и  $F$ -типов на тетраэдры. Представлен пример построения нецентросимметричной упаковки  $I$ -типа. Показан способ генерации зоноэдральной упаковки ( $P$ ) из тетраэдрической ( $I$ ) путем объединения тетраэдров в ней. Для каждого типа упаковки возможны по 3 локально-изоморфных варианта, различающиеся выбором узла в центре ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ ). При построении тетраэдрических разбиений после каждой итерации три локально-изоморфных варианта циклически превращаются друг в друга. Как следствие, структуры трех типов характерных кластеров являются взаимозависимыми. Икосаэдрическую упаковку любого типа можно построить на основе единого алгоритма при его инициализации с помощью одного единственного тетраэдра.

**Ключевые слова:** икосаэдрические квазикристаллы, правила подстановок, упаковки.

DOI: 10.61011/JTF.2025.01.59489.269-24

### Введение

Настоящая работа продолжает серию работ по теории строения икосаэдрических квазикристаллов [1,2]. При описании структуры квазикристаллов общепринятым на сегодняшний день является многомерный подход и, в частности, метод вырезания и проецирования (*cut-and-project*). В его основе лежит синтез ряда Фурье для некоторого периодического распределения в шестимерном пространстве на основе данных дифракционного эксперимента, отождествление его с распределением неких шестимерных „атомов“ и проецирование определенным образом вырезанной из него полосы в физическое 3D-пространство [3,4]. Как уже обсуждалось ранее [2], возникающие при этом проблемы приводят к отождествлению сразу нескольких различных кластеров с одной усредненной структурой, потере точной икосаэдрической симметрии и нарушению самоподобия. Теория строения квазикристаллов в ее современном виде не лишена внутренних противоречий, в том числе фундаментального характера. Прочитаем монографию [5]: „Трехмерный атом обладает определенной обыденной реальностью, которую не так-то легко отобразить на шесть измерений“.

Метод проецирования обычно противопоставляется методу, основанному на теории разбиений [6,7], что, вообще говоря, непонятно. Ведь оба наиболее значимых разбиения (зоноэдральное разбиение Соколар–Стейнхардта [8], и тетраэдрическое разбиение Данце-

ра [9,10]) сами по себе также получены путем проецирования из 6D-пространства.

Соколар и Стейнхардт показали, что если к интересующему нас разбиению предъявляется требование локального изоморфизма Пенроуза, то оно не должно содержать сплюснутых ромбоэдров. В частности, базовый набор могут составлять 4 золотых зоноэдра [8]. В той же работе показано, что в евклидовом пространстве существует ровно 3 совершенные упаковки с икосаэдрической точечной симметрией. Как следствие, в реальной структуре следует ожидать появления трех типов икосаэдрических кластеров. На практике же, наоборот, гораздо чаще используется разбиение на вытянутые и сплюснутые ромбоэдры (разбиение Амманна–Крамера–Нери [11]). Используются также неполные или смешанные наборы ячеек [12,13], либо модель перекрывающихся кластеров [14], чья теоретическая обоснованность является спорной. При этом при расшифровке реальных структур удается идентифицировать либо один, либо, в лучшем случае, два типа характерных кластеров [15,17].

Существует 3 типа икосаэдрических квазикристаллов —  $P$ ,  $I$  и  $F$  (по аналогии с примитивными, объемно-центрированными и гранецентрированными кубическими кристаллами) [18,19]. Доказано, что коэффициент самоподобия для квазирешеток всех трех типов должен быть равен  $\tau^3$ , а коэффициент инфляции должен быть равен  $\tau$  для  $I$ - и  $F$ -типов и  $\tau^3$  для  $P$ -типа, где  $\tau$  — золотое сечение [20,21]. По сути своей, этот факт отражает свойство самоподобия; он является прямым

следствием периодичности кубической  $6D$ -решетки, из которой осуществляется проецирование. Считается, что подавляющее большинство расшифрованных структур икосаэдрических квазикристаллов соответствует  $F$ -типу. Нам не известно ни одной работы, в которой проверялось бы соответствие расшифрованных структур требуемым параметрам инфляции. Считается [10], что разбиение Данцера полностью эквивалентно разбиению Соколара–Стейнхардта, но это утверждение не может быть истинным. Как было показано нами ранее [22,23], они характеризуются разными инфляционными множителями, что возможно, только если они соответствуют разным типам квазирешеток.

Наличие противоречий побудило нас к разработке теории строения квазикристаллов на основе теории разбиений и концепции элементарных ячеек [24]. Установление точного соответствия между тремя типами икосаэдрических квазикристаллов ( $P, I, F$ ) и тремя типами разбиений (зоноэдральным и двумя тетраэдрическими) [1] сделало возможным описание всех возможных вариантов икосаэдрических упаковок в рамках единого взаимосогласованного подхода. Общие принципы такого подхода были изложены в 1-й части работы [2]. Ниже подробно объясняются особенности построения икосаэдрических упаковок и кластеров для каждого из возможных типов квазирешеток по-отдельности.

## 1. Анализ симметрии

Общие принципы построения упаковок едины как для икосаэдрических, так и для большого многообразия аксиальных квазикристаллов [25]. В частности, значение коэффициента инфляции однозначно определяется тем, что инфляционная симметрия квазикристаллического  $3D$ -разбиения является следствием симметрии  $n$ -мерной порождающей решетки [20]. Иными словами, после изменения масштаба все получающиеся узлы квазирешетки должны быть проекциями узлов порождающей решетки.

Вся структура икосаэдрического квазикристалла в целом рассматривается нами как список ячеек [24]. Для каждой ячейки следует задать ее тип, а также положение и ориентацию в пространстве. Затем следует задать способ заполнения ячеек конкретными атомами с учетом их собственной симметрии и правил локального соответствия, чтобы гарантировать правильную „сшивку“ соседних ячеек разных типов в единое целое. Локальные симметрии ячеек и их возможные ориентации определяются методами теории групп на основе теоремы об орбите и стабилизаторе.

Чтобы записать формально правила подстановок, нам недостаточно знания матрицы подстановок. Для каждой из ячеек соответствующего базового набора необходимо выбрать локальную систему координат и расположить в ней ячейку, приняв одну из возможных ориентаций за стандартную. Такой ориентации теперь

будет соответствовать тождественный элемент группы симметрии. Любая другая ориентация будет задаваться определенным элементом симметрии (или целым классом левых сопряженных элементов по отношению к подгруппе-стабилизатору, если собственная симметрия ячейки не является тривиальной). Положение ячейки в пространстве будет задаваться сдвигом локальной системы координат ячейки по отношению к глобальной системе координат упаковки. Если для построения упаковки ячеек нам достаточно знания матрицы умножения соответствующей группы, то для определения позиций атомов требуются координатные представления матриц элементов симметрии.

Группа вращений икосаэдра  $I$  имеет порядок 60 и изоморфна знакопеременной группе  $A_5$ . Полная икосаэдральная группа  $I_h$  образуется добавлением центра инверсии к группе  $I$ , имеет порядок 120 и изоморфна симметрической группе  $S_5$ . К сожалению, в литературе нет единого подхода к нумерации элементов этих групп. Это зависит от того, идет ли речь об абстрактной математической группе перестановок или группе элементов симметрии икосаэдра, разбиты ли элементы на классы сопряженных элементов, или нумерация осуществляется в соответствии со степенями генераторов групп и т.д. Кроме того, возможны 2 различные установки координатных осей, отличающиеся поворотом на  $90^\circ$  относительно одной из осей 2-го порядка.

При выборе ориентации икосаэдра и схемы нумерации его вершин мы следуем работе [26] (см. рис. 1). Для элементов симметрии мы используем общепринятые обозначения, но для однозначной их идентификации в скобках уточняем, через какую именно вершину, грань или ребро проходит интересующая нас ось [27]. Элементы симметрии, рассортированные по классам, представлены в списке (1).

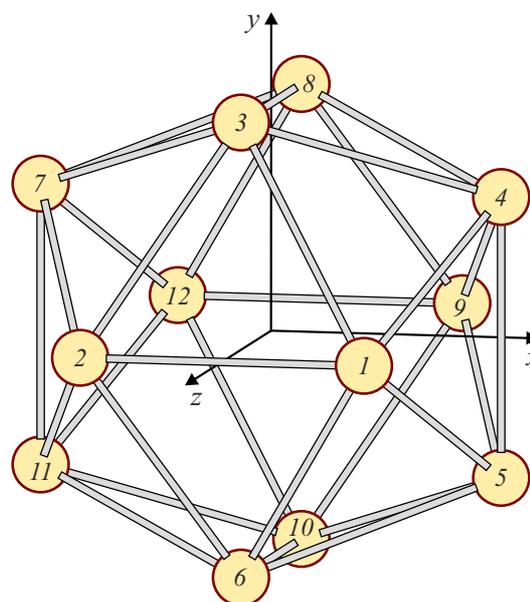


Рис. 1. Нумерация вершин икосаэдра.

$$I_h = \left\{ \begin{array}{l} E = \{1\}, \\ 12C_5 = \{5(1), 5(2), 5(3), 5(4), 5(5), 5(6), 5^4(1), 5^4(2), 5^4(3), 5^4(4), 5^4(5), 5^4(6)\}, \\ 12C_5^2 = \{5^2(1), 5^2(2), 5^2(3), 5^2(4), 5^2(5), 5^2(6), 5^3(1), 5^3(2), 5^3(3), 5^3(4), 5^3(5), 5^3(6)\}, \\ 20C_3 = \{3(132), 3(143), 3(154), 3(165), 3(126), 3(237), 3(387), 3(348), 3(498), 3(459), \\ \quad 3^2(132), 3^2(143), 3^2(154), 3^2(165), 3^2(126), \\ \quad 3^2(237), 3^2(387), 3^2(348), 3^2(498), 3^2(459)\}, \\ 15C_2 = \{2(12), 2(13), 2(14), 2(15), 2(16), 2(23), 2(34), 2(45), 2(56), 2(26), \\ \quad 2(27), 2(37), 2(38), 2(48), 2(49)\}, \\ C_i = \{\bar{1}\}, \\ 12S_{10}^3 = \{\bar{5}(1), \bar{5}(2), \bar{5}(3), \bar{5}(4), \bar{5}(5), \bar{5}(6), \bar{5}^9(1), \bar{5}^9(2), \bar{5}^9(3), \bar{5}^9(4), \bar{5}^9(5), \bar{5}^9(6)\}, \\ 12S_{10} = \{\bar{5}^7(1), \bar{5}^7(2), \bar{5}^7(3), \bar{5}^7(4), \bar{5}^7(5), \bar{5}^7(6), \bar{5}^3(1), \bar{5}^3(2), \bar{5}^3(3), \bar{5}^3(4), \bar{5}^3(5), \bar{5}^3(6)\}, \\ 20S_6 = \{\bar{3}(132), \bar{3}(143), \bar{3}(154), \bar{3}(165), \bar{3}(126), \bar{3}(237), \bar{3}(387), \bar{3}(348), \bar{3}(498), \bar{3}(459), \\ \quad \bar{3}^5(132), \bar{3}^5(143), \bar{3}^5(154), \bar{3}^5(165), \bar{3}^5(126), \\ \quad \bar{3}^5(237), \bar{3}^5(387), \bar{3}^5(348), \bar{3}^5(498), \bar{3}^5(459)\}, \\ 15\sigma = \{m(38), m(49), m(37), m(48), m(27), m(15), m(16), m(12), m(13), m(14), \\ \quad m(34), m(26), m(45), m(23), m(56)\}. \end{array} \right. = I \quad (1)$$

Например, ось 5-го порядка в обозначениях Шёнфлиса записывается как  $C_5$ , а в стандартных международных обозначениях Германа-Могена — символом 5. Тогда с учетом уточнений,  $C_5(1)$  или  $5(1)$  — это ось 5-го порядка, проходящая через вершину под номером 1. Аналогично  $3(132)$  — это ось 3-го порядка, проходящая через грань  $\triangle 132$  и циклически переставляющая местами ее вершины:  $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ . Такой порядок перестановки элементов объясняется тем, что за положительное направление вращения нами принято вращение против часовой стрелки, если смотреть на икосаэдр снаружи. Элемент  $2(12)$  — это ось 2-го порядка, проходящая через ребро  $[12]$  и меняющая местами его вершины  $1 \rightarrow 2$ . Элементы  $1$  и  $\bar{1}$  — тождественный элемент и инверсия соответственно.

Первые 60 элементов — это собственные вращения. Они образуют группу  $I$ . Остальные 60 элементов — это несобственные вращения (операции с определителем, равным  $-1$ ), т.е. инверсия, инверсионно-поворотные оси (либо соответствующие им зеркально-поворотные оси) и плоскости зеркального отражения. Напомним, что несобственные элементы симметрии меняют правую систему координат на левую, а также заменяют внешние нормали граней на внутренние, если их определять как векторное произведение образующих эти грани ребер. Это надо учитывать при последующей отрисовке ячеек упаковки.

Мы намеренно осуществили нумерацию элементов таким образом, чтобы композиция любого элемента группы  $I$  с инверсией давала элемент, номер которого был бы ровно на 60 больше. Например, композиция 2-го элемента  $5(1)$  с инверсией дает 62-й элемент в списке — инверсионно-поворотную ось  $\bar{5}$ , проходящую через вершину 1:  $\bar{5}(1) = \bar{1} \cdot 5(1)$ . Аналогично, композиция 26-го элемента  $3(132)$  с инверсией дает 86-й элемент в спис-

ке — инверсионно-поворотную ось  $\bar{3}$ , проходящую через грань  $\triangle 132$ :  $\bar{3}(132) = \bar{1} \cdot 3(132)$ . Чтобы определить перестановку, осуществляемую инверсионно-поворотной осью, надо удвоить длину цикла порождающего элемента  $(132132)$ , а затем на четных позициях  $(1*2*3*)$  заменить числа на номера противоположных вершин. В результате получится цикл:  $1 \rightarrow 10 \rightarrow 2 \rightarrow 12 \rightarrow 3 \rightarrow 9$ . Композиция 46-го элемента  $2(12)$  с инверсией дает 106-й элемент в списке — плоскость зеркального отражения, отображающую друг в друга вершины  $3 \rightarrow 8$ :  $m(38) = \bar{1} \cdot 2(12)$ .

Во избежание разночтений полный список всех элементов симметрии приведен в Приложении. Элементы разбиты по классам, 120 элементов образуют группу  $I_h$ . Для каждого элемента приведены соответствующие перестановки вершин и матрицы поворотов.

Теперь мы можем приступить к детальному объяснению алгоритмов построения всех возможных вариантов икосаэдрических упаковок.

## 2. Упаковки $I$ - и $F$ -типов

Резюмируем выводы, сделанные в предыдущей части работы [1,2,24]. Икосаэдрические квазирешетки всех трех типов ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) являются упаковками элементарных ячеек. Выбор базового набора ячеек не является произвольным. Их форма выводится путем проецирования многогранника Вороного соответствующей  $6D$ -решетки. Набор зонэдров для квазирешетки  $P$ -типа получается при проецировании элементарного  $6D$ -гиперкуба целочисленной решетки  $Z^6$ , а наборы тетраэдров для  $I$  и  $F$ -типов — из корневого политопа решетки корней  $D_6$ . Свойства различных многомерных решеток и используемые для них обозначения подробно описаны в монографии [28].

В пространствах четных размерностей схема центрирования  $F$ -типа включает в себя все узлы, соответствующие  $I$ -типу, в качестве подмножества. Как следствие, наборы ячеек и правила подстановок для всех трех типов обязаны быть полностью взаимосогласованными. В квазирешетку  $P$ -типа добавляются новые узлы с образованием квазирешетки  $I$ -типа, к которой добавляются еще новые узлы с образованием квазирешетки  $F$ -типа. При этом зоноэдры разбиваются на тетраэдры, которые, в свою очередь, еще раз разбиваются на тетраэдры немного отличающегося базового набора.

Таким образом, построение любого возможного варианта самоподобной икосаэдрической упаковки базируется на совместном использовании трех взаимосогласованных разбиений, для каждого из которых используется свой базовый набор элементарных ячеек и свои правила подстановок.

Квазирешетке  $P$ -типа соответствует разбиение Соколар-Стейнхардта на четыре типа зоноэдров  $\{GR, RD, RI, RT\}$ . Квазирешетке  $F$ -типа соответствует разбиение Данцера. Стандартная процедура его построения изложена в [29,30]. Чтобы удовлетворить требованию взаимной согласованности, мы заменяем в нем базовые тетраэдры  $\{A, B, C, K\}$  [9] на их уменьшенные в  $\tau$  раз копии —  $\{a, b, c, k\}$ . Эта процедура не сводится к тривиальному изменению масштаба, поскольку ей сопутствует еще и изменение типов узлов в вершинах тетраэдров. Квазирешетке  $I$ -типа соответствует еще одно тетраэдрическое разбиение, базовый набор которого образуют три уменьшенные в  $\tau$  раз копии тетраэдров Данцера и еще один тетраэдр исходного размера —  $\{a, c, k, K\}$ . Последнее разбиение упоминалось одной строкой в основополагающей работе Данцера [9], но должного внимания ему с тех пор никем уделено не было. На его фундаментальное значение как упаковки  $I$ -типа было указано нами [1].

Важно правильно выбрать стандартные ориентации ячеек. Для всех ячеек, кроме тетраэдра  $a$ , выбор был достаточно очевиден. Дело в том, что в обоих базовых наборах 3 тетраэдра из 4-х впоследствии используются для формирования стартовых конфигураций. Соответствующая вершина тетраэдра совмещается с центром глобальной системы координат будущей упаковки. Действуя группой  $I_h$  на ячейку, мы получаем 120 ее копий — полную орбиту. Объединенные вместе, они образуют многогранник с симметрией икосаэдра — возможную стартовую конфигурацию. При этом все ребра, выходящие из центрального узла, оказываются осями симметрии икосаэдра — 2-го, 3-го и 5-го порядков. Мы сочли естественным ориентировать тетраэдры относительно системы координат икосаэдра. Подчеркнем особо: наш выбор отличается от принятого в литературе [29].

Для 3-х тетраэдров из 4-х выберем стандартную ориентацию таким образом, чтобы соответствующая вершина оказалась в центре локальной системы координат ячейки; ребро, параллельное оси 2-го порядка, направим

вдоль оси  $x$ ; ребро, параллельное оси 5-го порядка, расположим так, чтобы оно было в плоскости  $(xy)$ ; ребро, параллельное оси 3-го порядка, окажется в плоскости  $(xz)$ ; при этом координаты всех вершин будут неотрицательными. Для тетраэдра  $a$  ребро, параллельное оси 2-го порядка, мы также направим вдоль оси  $x$ , а ориентацию выберем такую, чтобы координаты всех вершин были неотрицательными. Такой выбор оказывается удобным при формулировании универсального алгоритма генерации упаковки, но потребует определенной коррекции при рассмотрении правых и левых энантиоморфных форм.

Координаты вершин тетраэдров Данцера в ориентации, принятой нами в качестве стандартной, приведены в табл. 1. Для координат вершин мы используем безразмерные величины. Для каждой вершины приведен ее тип ( $A, B, C, F$ ). Во избежание путаницы при совпадении символов в принятых обозначениях для вершин мы используем прямой шрифт, а для тетраэдров Данцера ( $A, B, C, K$ ) и типов упаковок по Левитову ( $P, I, F$ ) — наклонный (пояснения см. в [2]).

Таблица 1. Тетраэдры Данцера

Тип тетраэдра	Тип и координаты вершин	Входит в базовый набор
$a$	$A(0, 0, 0)$ $A(2, 0, 0)$ $C(1 + \tau, \tau, 0)$ $B(1, 0, \tau)$	$I, F$
$b$	$C(0, 0, 0)$ $C(2, 0, 0)$ $A(1 + \tau, \tau, 0)$ $B(1 + \tau, 0, 1)$	$F$
$c$	$B(0, 0, 0)$ $B(2\tau, 0, 0)$ $A(\tau, 1, 0)$ $C(1 + \tau, 0, 1)$	$I, F$
$k$	$A(0, 0, 0)$ $F(\tau, 0, 0)$ $B(\tau, 1, 0)$ $C(\tau, 0, -1 + \tau)$	$I, F$
$K$	$C(0, 0, 0)$ $F(1 + \tau, 0, 0)$ $A(1 + \tau, \tau, 0)$ $B(1 + \tau, 0, 1)$	$I$

Обратим внимание на важное свойство всех тетраэдров Данцера — все их ребра параллельны одной из осей симметрии икосаэдра (2-го, 3-го или 5-го порядков), а нормали ко всем граням всегда параллельны осям 2-го порядка. Координаты всех вершин принадлежат кольцу квадратичных целых поля  $\mathbb{Q}(\sqrt{5})$ . Следовательно, координаты всех узлов построенной из них упаковки также будут квадратичными целыми [31].

Как уже отмечалось выше, в отличие от разбиения Соколар-Стейнхардта на зоноэдры, для которого коэффициент инфляции равен  $\tau^3$ , для обоих разбиений на тетраэдры Данцера он равен  $\tau$ . Поэтому алгоритм генерации упаковки остается практически без изменений, надо только заменить множитель инфляции:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_k &= \tau \mathbf{R}_i + g_i \mathbf{R}_j, \\ g_k &= g_i g_j. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь, как и в случае упаковок зоноэдров [24,27],  $\mathbf{R}_i$  и  $g_i$  обозначают положение и ориентацию порождающей ячейки (родительской),  $\mathbf{R}_j$  и  $g_j$  обозначают положение и ориентацию порождаемой ячейки (дочерней) в схеме дефляции для стандартной ориентации родительской ячейки, а  $\mathbf{R}_k$  и  $g_k$  обозначают положение и ориентацию порождаемой ячейки, но уже в глобальной упаковке.

Есть еще одно существенное отличие, связанное с циклической сменой типов узлов при каждой итерации:  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Оно будет пояснено ниже.

Построение икосаэдрической упаковки  $I$ -типа на основе тетраэдрического  $ackK$ -разбиения иллюстрирует рис. 2. На рисунке вверху представлены 4 тетраэдра  $\{a, c, k, K\}$ , ориентированные относительно осей симметрии икосаэдра. Именно для такой ориентации в табл. 1 выписаны координаты вершин. Ее мы приняли за стандартную. Узлы разных типов помечены разными цветами: А (белые), В (черные), С (красные), F (бирюзовые). Так как существует 2 типа ребер  $[AB]$  одинаковой длины, ребра 2-го типа также выделены цветом (пояснения см. в [1]). Порядок выписывания тетраэдров в обоих базовых наборах был принят Данцером [9]:  $\{A, B, C, K\}$  и  $\{A, C, K, \tau K\}$ , после смены масштаба —  $\{a, b, c, k\}$  и  $\{a, c, k, K\}$  соответственно. Чтобы подчеркнуть тот факт, что во втором базовом наборе увеличенный тетраэдр  $K$  используется вместо  $B$ , на рисунке мы его разместили вторым. Во втором ряду представлены правила подстановок: тетраэдры увеличиваются в  $\tau$  раз и состояются из тетраэдров исходного размера. Правила подстановок, записанные как списки ячеек, приведены в табл. 2.

Далее на рис. 2 представлены правила подстановок в виде упаковок полиэдров. Один единственный тетраэдр можно использовать для инициализации алгоритма построения всей упаковки. Всего существует 3 локально изоморфных варианта упаковки (с центрами в узлах А, В, С). Действуя на соответствующий тетраэдр всеми элементами группы симметрии икосаэдра, мы получаем 120 его копий, объединенных в стартовую конфигурацию. После применения 1-й итерации мы получаем фрагмент упаковки в форме многогранника стартовой конфигурации, увеличенного в  $\tau$  раз.

Объясним теперь свойство, связанное с циклической сменой типов узлов при каждой итерации:  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Меняются все узлы, в том числе и центральные. При применении инфляции и дефляции к стартовой конфигурации упаковки  $C$  (триаконтаэдр из 120 тетраэдров  $K$ ),

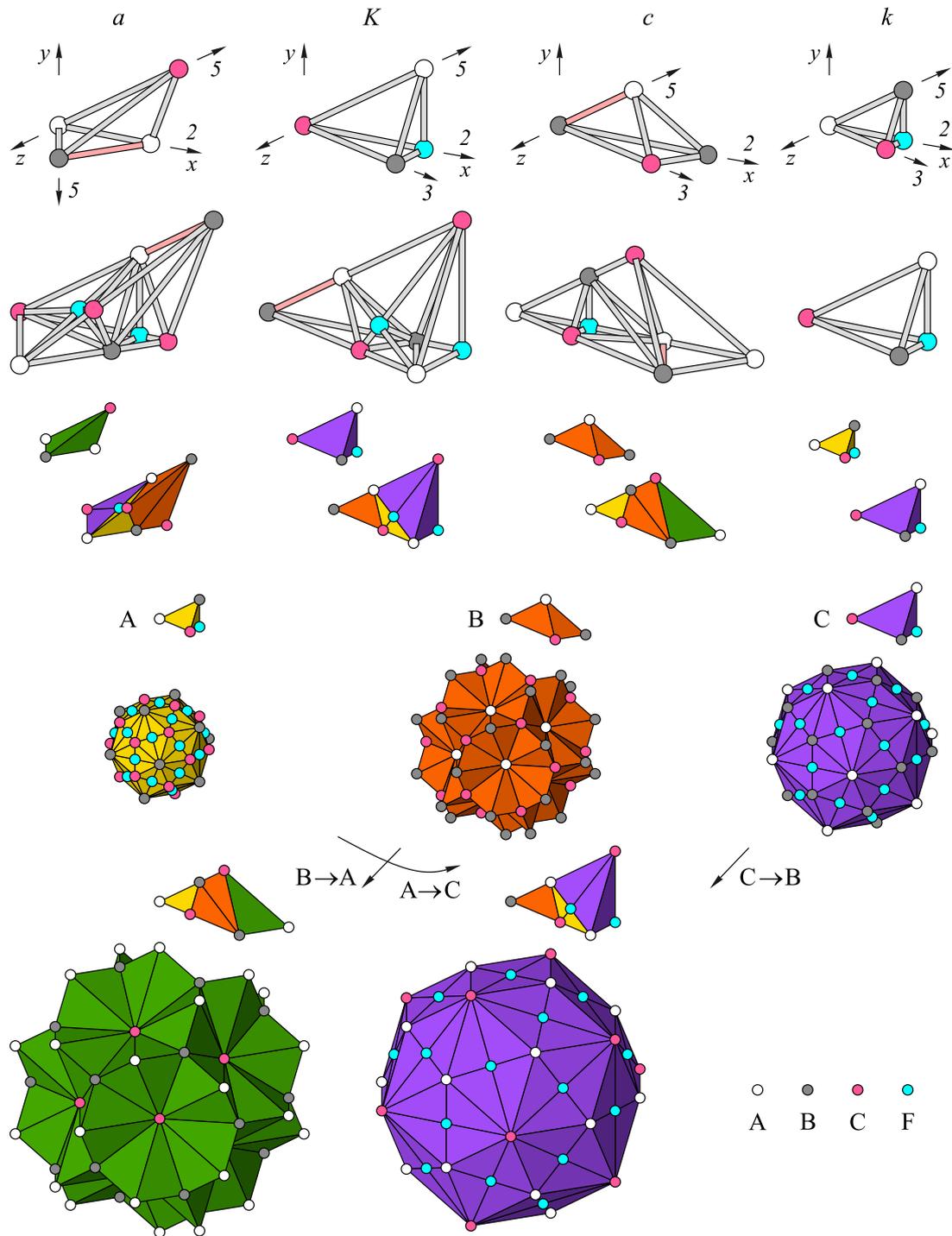
Таблица 2. Правила подстановок для упаковки  $I$ -типа

№ $j$	Тип ячейки	Положение $\mathbf{R}_j$	Ориентация	
			№	$g_j$
$a \rightarrow \text{infl}(a)$				
1	$K$	(0, 0, 0)	1	1
2	$K$	(0, 0, 0)	111	$m(15)$
3	$K$	(0, 0, 0)	28	$3(154)$
4	$k$	(1 + $\tau$ , $\tau$ , 0)	104	$\bar{5}^5(498)$
5	$k$	(1 + $\tau$ , $\tau$ , 0)	20	$5^3(1)$
6	$k$	( $\tau$ , 0, 1 + $\tau$ )	102	$\bar{3}^5(387)$
7	$c$	(1 + 2 $\tau$ , 1 + $\tau$ , 0)	54	$2(56)$
8	$c$	(1 + 2 $\tau$ , 1 + $\tau$ , 0)	77	$\bar{5}^7(4)$
$K \rightarrow \text{infl}(K)$				
1	$c$	(0, 0, 0)	1	1
2	$k$	( $\tau$ , 1, 0)	76	$\bar{5}^7(3)$
3	$k$	(1 + 2 $\tau$ , 0, $\tau$ )	55	$2(26)$
4	$K$	(1 + 2 $\tau$ , 1 + $\tau$ , 0)	54	$2(56)$
5	$K$	(1 + 2 $\tau$ , 1 + $\tau$ , 0)	63	$\bar{5}(2)$
6	$K$	(1 + 2 $\tau$ , 1 + $\tau$ , 0)	41	$3^2(237)$
$c \rightarrow \text{infl}(c)$				
1	$k$	(0, 0, 0)	1	1
2	$k$	(2 $\tau$ , 0, 0)	113	$m(12)$
3	$c$	(1 + 2 $\tau$ , 0, $\tau$ )	55	$2(26)$
4	$c$	(1 + 2 $\tau$ , 0, $\tau$ )	66	$\bar{5}(5)$
5	$a$	(2 + 2 $\tau$ , 0, 0)	113	$m(12)$
$k \rightarrow \text{infl}(k)$				
1	$K$	(0, 0, 0)	1	1

получается вовсе не 2-й слой той же самой упаковки (как интуитивно ожидалось), а фрагмент упаковки В в форме увеличенного в  $\tau$  раз триаконтаэдра. Иными словами, применение очередной итерации к упаковке С превращает ее в упаковку В. Применение очередной итерации к упаковке В превращает ее в упаковку А. Применение очередной итерации к упаковке А превращает ее в упаковку С.

После трех итераций цикл замыкается:  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Мы можем сделать 3 важных вывода. Во-первых, коэффициент инфляции алгоритма подстановок равен  $\tau$ , а коэффициент самоподобия упаковки —  $\tau^3$ . Во-вторых, любой из трех вариантов упаковки может быть построен из одного единственного тетраэдра. В качестве такового может выступать любой тетраэдр кроме  $a$ . В-третьих, строение характерных кластеров, расположенных в узлах А, В и С, является взаимосвязанным. В частности, если в структуре идеального икосаэдрического квазикристалла узлы А и В образуют триаконтаэдр вокруг узла С, то С и А образуют триаконтаэдр в  $\tau$  раз большего размера вокруг В, а В и С образуют триаконтаэдр в  $\tau^2$  раз большего размера вокруг А.

При программной реализации алгоритма вначале надо задать стартовую ячейку (или небольшой стартовый кластер из нескольких ячеек, см. ниже). Например,



**Рис. 2.** Построение икосаэдрической упаковки  $I$ -типа на основе тетраэдрического  $ackK$ -разбиения. Сверху вниз: базовый набор 4-х тетраэдров  $\{a, c, k, K\}$  в стандартной ориентации и правила подстановок в виде шаростержневых моделей; правила подстановок в виде упаковок тетраэдров; 3 тетраэдра, используемые для инициализации процедуры построения 3-х вариантов упаковки (с центрами в узлах A, B и C), составленные из них симметричные стартовые конфигурации и результат применения к ним 1-й итерации. Узлы разных типов выделены цветами: A (белые), B (черные), C (красные), F (бирюзовые).

мы начинаем строить упаковку с центром в узле A. Стартовой ячейкой является тетраэдр  $k$ . На этой стадии выполнения алгоритма вся упаковка состоит из одной единственной ячейки, а список ячеек — из одной единственной строки: тип ячейки  $k$ , положение  $(0, 0, 0)$ ,

ориентация — 1 (тождественное преобразование). Теперь мы должны размножить стартовую ячейку группой симметрии  $I_h$ , получится стартовая конфигурация в форме триконтаэдра из 120 тетраэдров  $k$ . Список ячеек после этого будет содержать 120 строк: тип всех ячеек  $k$ ,

положение всех ячеек задается вектором  $(0, 0, 0)$ , а вот ориентации у всех разные — от 1 до 120 (полная орбита ячейки). Этап инициализации завершен, теперь можно переходить к итерационному алгоритму инфляций и дефляций.

На этой стадии каждый раз осуществляется перебор списка ячеек, полученного в предыдущей итерации. Для каждой ячейки списка в зависимости от ее типа выбирается нужное правило из табл. 2 и в соответствии с уравнениями (2) в нужном месте пространства генерируется новый кластер ячеек в требуемой ориентации. В частности, список из 120 тетраэдров  $k$  (триаконтаэдр с центром в узле А) порождает новый список из 120 тетраэдров  $K$  (увеличенный в  $\tau$  раз триаконтаэдр с центром в узле С). На рис. 2 это превращение отмечено изогнутой стрелкой от А к С. Переходим к следующей итерации. Каждый из 120 тетраэдров  $K$  порождает по 6 новых тетраэдров в соответствии с табл. 2 и уравнениями (2). В результате получается увеличенный в  $\tau^2$  раз триаконтаэдр с центром в узле В. Внутри находится стартовая конфигурация для узла В: 120 тетраэдров  $c$ , и 240 тетраэдров  $k$ , вместе образующие звезду ромбоэдров. На рис. 2 это превращение отмечено кривой стрелкой от С к В. Далее процесс генерации упаковки продолжается до достижения требуемого размера.

Икосаэдрическая упаковка  $F$ -типа строится нами на основе классического разбиения Данцера, тетраэдры которого уменьшены в  $\tau$  раз (рис. 3). На рисунке представлены 4 тетраэдра базового набора в ориентации, принятой нами в качестве стандартной, правила подстановок для них, стартовые конфигурации и результат применения 1-й итерации. Правила подстановок для разбиения Данцера с уменьшенными тетраэдрами приведены в табл. 3.

Для разбиения Данцера также характерна циклическая смена типов узлов. Для обоих тетраэдрических разбиений 3 варианта локально изоморфных упаковок циклически превращаются друг в друга после каждой итерации.

Здесь имеет место аналогия со свойствами разбиения Пенроуза. Для него коэффициент инфляции равен  $\tau$ , а коэффициент самоподобия —  $\tau^2$ . Две конфигурации („звезда“ и „солнце“) циклически преобразуются друг в друга после каждой итерации [32]. Скорее всего, таким же свойством будут обладать самоподобные ромбические разбиения с осью симметрии 7-го порядка [33], если для них удастся решить проблему неоднозначного выбора правил дефляции плиток.

Мы полагаем, что аналогичный алгоритм после внесения небольших изменений может быть применен для построения практически любого разбиения, основанного на подстановках (*substitution tilings*) [29], включая циклотомические разбиения с осями симметрии более высоких порядков [34], самоподобные ромбические разбиения с осью симметрии 7-го порядка и несколькими правилами подстановок для плиток одинаковой формы [33], разбиения типа „вертушки“ Конвея–Радиана с плотным

**Таблица 3.** Правила подстановок для упаковки  $F$ -типа

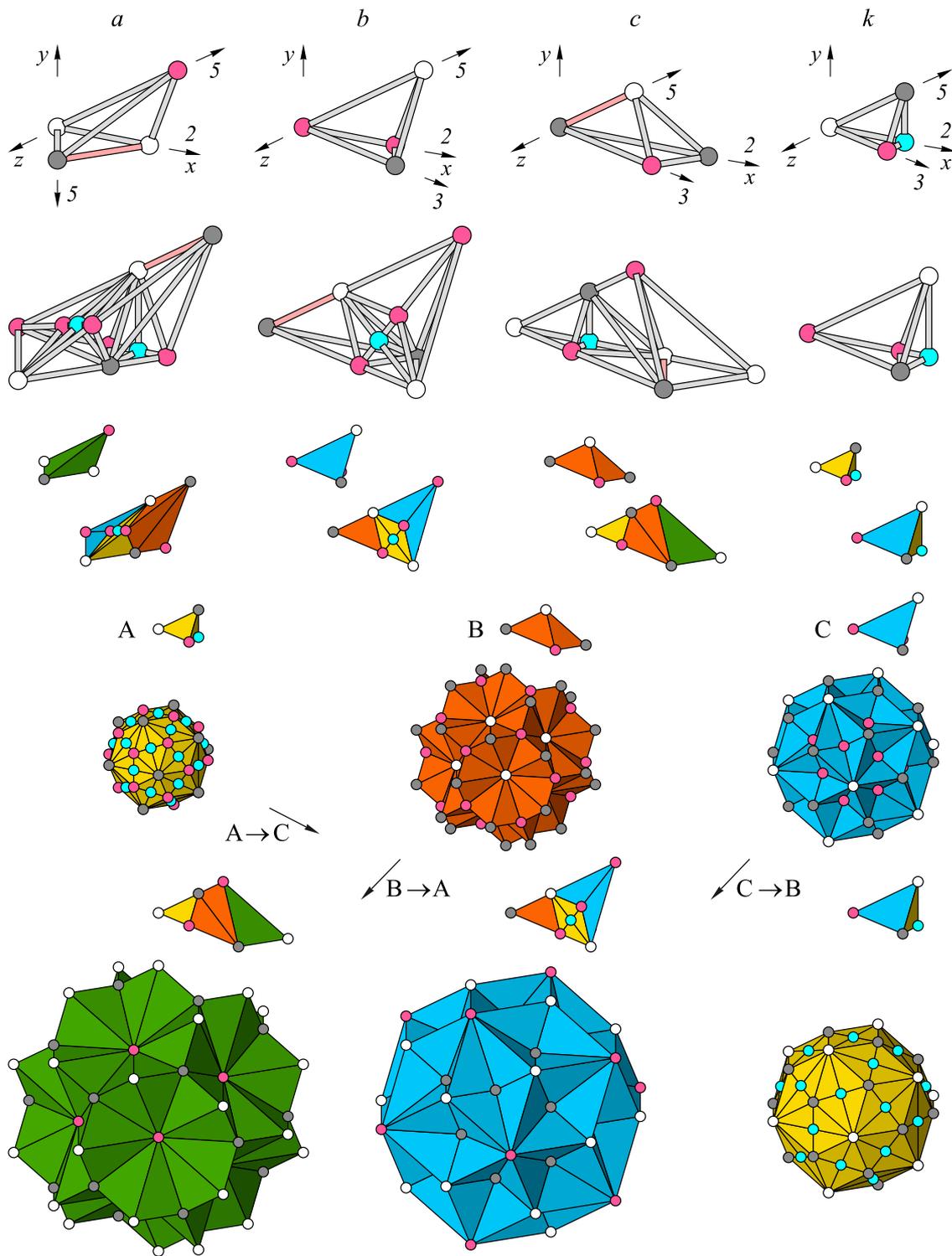
№ $j$	Тип ячейки	Положение $\mathbf{R}_j$	Ориентация	
			№	$g_j$
$a \rightarrow \text{infl}(a)$				
1	$b$	$(0, 0, 0)$	1	1
2	$b$	$(0, 0, 0)$	111	$m(15)$
3	$b$	$(0, 0, 0)$	28	$3(154)$
4	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	41	$3^2(237)$
5	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	64	$\bar{5}(3)$
6	$k$	$(\tau, 0, 1 + \tau)$	60	$2(49)$
7	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	104	$\bar{3}^5(498)$
8	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	20	$5^3(1)$
9	$k$	$(\tau, 0, 1 + \tau)$	102	$\bar{3}^5(387)$
10	$c$	$(1 + 2\tau, 1 + \tau, 0)$	54	$2(56)$
11	$c$	$(1 + 2\tau, 1 + \tau, 0)$	77	$\bar{5}^7(4)$
$b \rightarrow \text{infl}(b)$				
1	$c$	$(0, 0, 0)$	1	1
2	$k$	$(\tau, 1, 0)$	76	$\bar{5}^7(3)$
3	$k$	$(1 + 2\tau, 0, \tau)$	55	$2(26)$
4	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	38	$3^2(154)$
5	$k$	$(1 + 2\tau, 0, \tau)$	66	$\bar{5}(5)$
6	$b$	$(1 + 2\tau, 1 + \tau, 0)$	54	$2(56)$
7	$b$	$(1 + 2\tau, 1 + \tau, 0)$	63	$\bar{5}(2)$
$c \rightarrow \text{infl}(c)$				
1	$k$	$(0, 0, 0)$	1	1
2	$k$	$(2\tau, 0, 0)$	113	$m(12)$
3	$c$	$(1 + 2\tau, 0, \tau)$	55	$2(26)$
4	$c$	$(1 + 2\tau, 0, \tau)$	66	$\bar{5}(5)$
5	$a$	$(2 + 2\tau, 0, 0)$	113	$m(12)$
$k \rightarrow \text{infl}(k)$				
1	$b$	$(0, 0, 0)$	1	1
2	$k$	$(1 + \tau, \tau, 0)$	41	$3^2(237)$

распределением возможных ориентаций плиток [35,36] и др.

### 3. Энантиоморфизм

Общие принципы построения нецентросимметричных упаковок были кратко изложены в предыдущей части [2]. В группе  $I_h$  все 120 копий каждого из тетраэдров являются эквивалентными. В группе  $I$  различным образом ориентированные ячейки и их зеркальные копии следует считать различными. Можно было бы сгруппировать несколько тетраэдров одного типа с их зеркальными копиями в асимметричные октаэдры [29] и уже их использовать в качестве асимметричных элементарных ячеек. Есть более простое решение.

Прежде всего сделаем уточнение. В рамках предлагаемой теории рассматриваются все 3 типа упаковок —  $P$ ,  $I$ ,  $F$ . Здесь символом  $I$  традиционно обозначается икосаэдрический аналог объемно-центрированной кубической решетки. Все 3 типа могут обладать как группой



**Рис. 3.** Построение икосаэдрической упаковки  $F$ -типа на основе тетраэдрического  $abck$ -разбиения. Сверху вниз: базовый набор тетраэдров  $\{a, b, c, k\}$  в стандартной ориентации и правила подстановок в виде шаростержневых моделей; правила подстановок в виде упаковок тетраэдров; 3 тетраэдра, используемые для инициализации процедуры построения 3-х вариантов упаковок (с центрами в узлах A, B и C), составленные из них симметричные стартовые конфигурации и результат применения к ним 1-й итерации.

симметрии  $I_h$ , так и группой симметрии  $I$ . В таком контексте символу  $I$  соответствует группа вращений икосаэдра в обозначениях Шёнфлиса. Там, где могут

возникнуть разночтения, мы будем добавлять к обозначениям группы симметрии символы Германа–Могена:  $235 (I), m\bar{3}5$ .

Итак, начнем с рассмотрения упаковки  $I$ -типа, обладающей симметрией 235 (группа  $I$ ). Возьмем тетраэдры базового набора  $\{a, c, k, K\}$  и повернем их всеми элементами симметрии группы  $I_h$ . Получится по 120 ориентаций. Половину из них можно условно считать „правыми“, а другую половину — „левыми“. Нет необходимости выбирать ячейки другой формы, нет необходимости вносить изменения в алгоритм построения упаковки. Достаточно посмотреть на номер ориентации конкретной ячейки в списке. Если номер находится в интервале от 61 до 120, то это зеркальная ориентация.

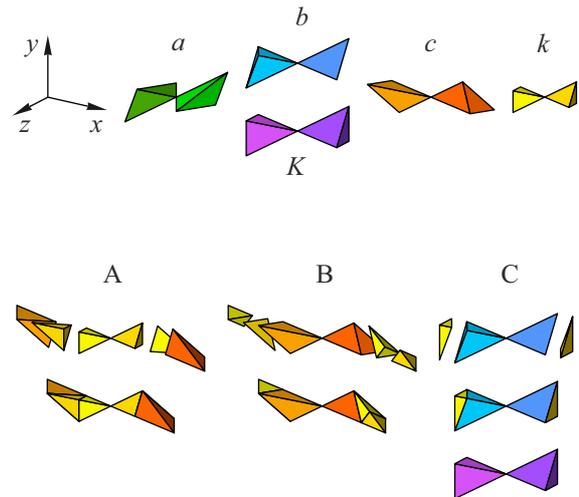
Для тетраэдров  $\{c, k, K\}$  начальную ориентацию и ориентации, полученные из нее при помощи подгруппы чистых вращений  $I$ , будем считать правыми, остальные — левыми. Исключением из общего правила является тетраэдр  $a$ , для которого порядок определения правых и левых ориентаций надо заменить на противоположный. Благодаря такому выбору получится упаковка тетраэдров, построенная по принципу „сторона к стороне“, причем правый тетраэдр в ней всегда будет соседствовать с левым вне зависимости от конкретного его типа.

При построении нецентросимметричной упаковки  $F$ -типа единственное отличие заключается в том, что вместо набора  $\{a, c, k, K\}$  используется набор  $\{a, b, c, k\}$ . Два правых и два левых тетраэдра  $b$  и  $k$  группируются вместе и используются вместо соответствующих правых и левых тетраэдров  $K$ . Общий принцип, заключающийся в том, что грань правого тетраэдра всегда соприкасается с гранью левого, нарушается только в случае общей грани пары соседних тетраэдров  $b$  и  $k$ .

Построение нецентросимметричных икосаэдрических упаковок поясняют рис. 4, 5.

На рис. 4 изображены правые и левые тетраэдры Данцера, используемые для построения нецентросимметричных икосаэдрических упаковок. Левые ориентации получаются из правых при помощи операции инверсии. Если в наборе  $\{a, b, c, k\}$ , используемом для построения упаковки  $F$ , вместо пары правых и левых тетраэдров  $b$  взять соответствующую пару тетраэдров  $K$ , получится набор  $\{a, c, k, K\}$  для построения упаковки  $I$ .

Правые и левые тетраэдры в группе симметрии 235 ( $I$ ) не эквивалентны. Формально базовые наборы содержат удвоенное число тетраэдров:  $\{\bar{a}, c, k, K, a, \bar{c}, \bar{k}, \bar{K}\}$  для упаковки  $I$ -типа, порождаемой из шестимерной оцк решетки, и  $\{\bar{a}, b, c, k, a, \bar{b}, \bar{c}, \bar{k}\}$  для упаковки  $F$ -типа, порождаемой из шестимерной гцк решетки. Здесь для обозначения тетраэдров в зеркальной ориентации мы использовали символ инверсии. Однако, повторимся, процедура построения упаковок для групп  $I$  и  $I_h$  ничем не отличается. Для группы  $I$  различия появляются лишь на следующем этапе, когда выбирается способ декорирования ячеек конкретными атомами в зависимости от того, попадает ли ориентация ячейки в интервал 1–60 или в интервал 61–120 (см. табл. 4 в Приложении).

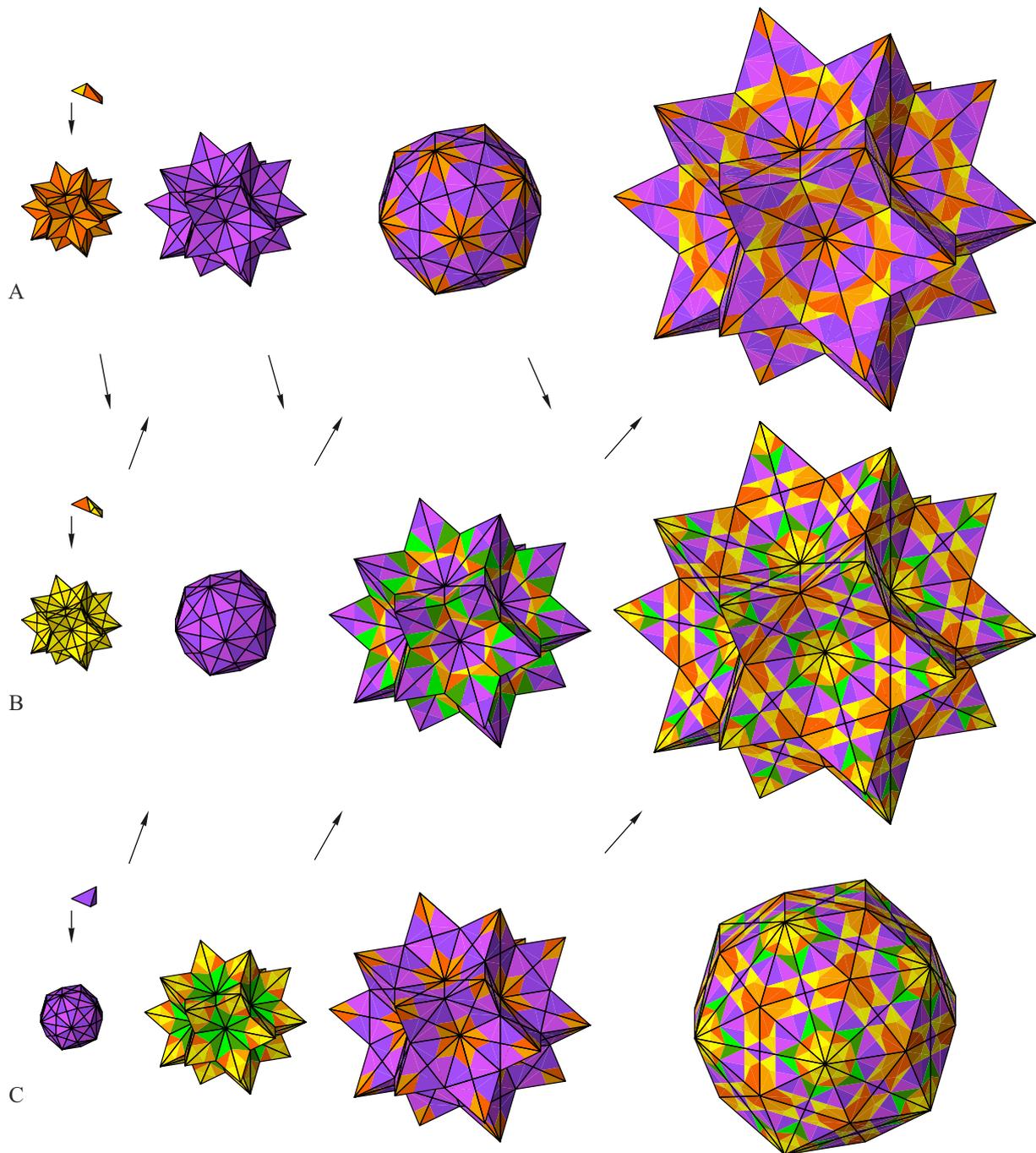


**Рис. 4.** Принципы построения нецентросимметричных икосаэдрических упаковок;верху — используемая ориентация координатных осей и базовые наборы ориентированных относительно них правых и левых тетраэдров Данцера; внизу — конфигурации тетраэдров, используемые для инициализации 3-х вариантов упаковок (с центрами в узлах А, В, С). На цветном варианте рисунка, представленном в электронной версии статьи, для отрисовки правых тетраэдров используются более темные палитры цветов.

Также на рис. 4 представлены конфигурации, используемые для инициализации процедуры построения 3-х вариантов упаковок (с центрами в узлах А, В и С). При такой инициализации алгоритма стартовыми конфигурациями становятся звезды ромбоэдров (гексеконтаэдры) и триаконтаэдр. Аналогия с построением разбиения Соколара–Стейнхардта [22,24] становится очевидной. Это позволяет установить точное соответствие между упаковками тетраэдров и упаковками зоноэдров, а, в конечном счете, между всеми тремя типами квазирешеток ( $P, I, F$ ).

Построение упаковки  $I$ -типа с симметрией 235 ( $I$ ) показано на рис. 5. Представлены результаты применения 3-х итераций. Стартовые конфигурации — это 2 гексеконтаэдра (варианты А и В упаковки  $I$ ), отличающиеся ориентацией образующих их ромбоэдров, и триаконтаэдр (вариант С упаковки  $I$ ). Представлены результаты применения 3-х итераций. С каждой итерацией размеры всех конфигураций увеличиваются в  $\tau$  раз, а типы всех узлов циклически меняются местами  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Как следствие, 3 локально изоморфных варианта упаковки превращаются друг в друга. В частности, 120 тетраэдров  $K$  объединяются в триаконтаэдр (стартовую конфигурацию варианта С упаковки), он увеличивается в  $\tau$  раз и становится фрагментом упаковки В, затем он увеличивается еще раз и становится фрагментом упаковки А и только после 3-й итерации вновь становится упаковкой С.

На рис. 5 горизонтально расположены 3 ряда упаковок, центрированных на узлах 3-х типов: А, В, С.



**Рис. 5.** Построение икосаэдрической упаковки  $I$ -типа с симметрией  $235 (I)$ . Стартовыми конфигурациями являются 2 звезды ромбоэдров (А и В) и триаконтаэдр (С). Представлены результаты применения 3-х итераций. С каждой итерацией размеры всех конфигураций увеличиваются в  $\tau$  раз, а типы всех узлов циклически меняются местами  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ .

Вертикально расположены стартовые конфигурации и результаты применения к ним 3-х последовательных итераций. Стрелки указывают на то, что после каждой итерации фрагменты упаковок с узлами различных типов в центре не только увеличиваются в размерах, но и циклически превращаются друг в друга.

Обратим внимание на принципиальные различия в симметрии орнаментов, получающихся на разных гранях

и на чередование правых и левых тетраэдров, образующих упаковку.

Увеличенный в  $\tau^3$  раз триаконтаэдр содержит более 12 000 различным образом ориентированных базовых тетраэдров, а звезды ромбоэдров после 3-х итераций содержат более 16 000 тетраэдров. В этом нетрудно убедиться, возведя в куб матрицу композиции разбиения, приведенную нами в первой части работы [2].

Построение упаковки  $F$ -типа полностью аналогично. О генерации больших фрагментов разбиения Данцера сообщалось в литературе [37]. Возможно, малого числа тетраэдров оказывалось недостаточно для установления фундаментальных свойств икосаэдрических упаковок, а большое их число слишком сильно усложняло анализ.

#### 4. Упаковка $P$ -типа

В литературе существует устоявшееся мнение, что разбиение Соколара–Стейнхардта на зоноэдры полностью эквивалентно  $ABCK$ -разбиению Данцера на тетраэдры (с поправкой, что подразумевается эквивалентность в смысле их взаимной локальной выводимости) [10]. Также утверждалось, что оба эти разбиения описывают икосаэдрические аналоги гранецентрированной кубической решетки [38]. Еще раз повторим: упаковка зоноэдров описывает квазикристаллы  $P$ -типа, т.е. аналоги примитивной кубической решетки [1,2].

Правила подстановок для упаковки зоноэдров были выведены нами [22,23] спустя почти три десятка лет после их открытия [8]. Формализация алгоритма построения упаковки зоноэдров позволила установить ряд важных ее особенностей [24,27]. Для вывода схемы дефляции триаконтаэдра достаточно задать позиции и ориентации всего лишь 12-ти полиэдров, но после размножения их группой симметрии икосаэдра полная схема дефляции триаконтаэдра будет содержать уже список из 533-х записей. Схемы дефляции остальных зоноэдров выводятся из схемы дефляции триаконтаэдра. В итоге общий список полиэдров, образующих правила подстановок для всех 4-х зоноэдров, занимает несколько десятков страниц.

Есть другой вариант — ввести „фиктивные“ позиции  $C$ , построить упаковку  $I$ -типа из тетраэдров  $\{a, c, k, K\}$ , после чего удалить из построенного разбиения все только что введенные узлы типа  $C$ . Поскольку схема центрирования  $I$ -типа лишь добавляет новые узлы к примитивной кубической  $6D$ -решетке, но самой решетки  $Z^6$  не меняет, то их удаление ожидаемо вернет все обратно на круги своя — к решетке  $P$ -типа. Мы уже отмечали, что коэффициент инфляции для квазикристаллов  $P$ -типа равен  $\tau^3$ . Следовательно, наша задача — установить соответствие между правилами подстановок для зоноэдров и 3-й итерацией алгоритма инфляций–дефляций для упаковки тетраэдров Данцера с базисным набором  $\{a, c, k, K\}$ .

Связь между разбиением Соколара–Стейнхардта на золотые зоноэдры и разбиениями на основе тетраэдров Данцера иллюстрирует рис. 6. Как ожидалось, тетраэдры  $\{a, c, k, K\}$ , сгруппированные вокруг общей вершины  $C$ , образуют зоноэдры  $\{GR, RD, RI, RT\}$ . Эквивалентная схема диссекции зоноэдров, но для стандартного разбиения Данцера, описывалась в [38]. Тщательное сравнение упаковок позволило установить точное соответствие между правилами подстановок для зоноэдров и

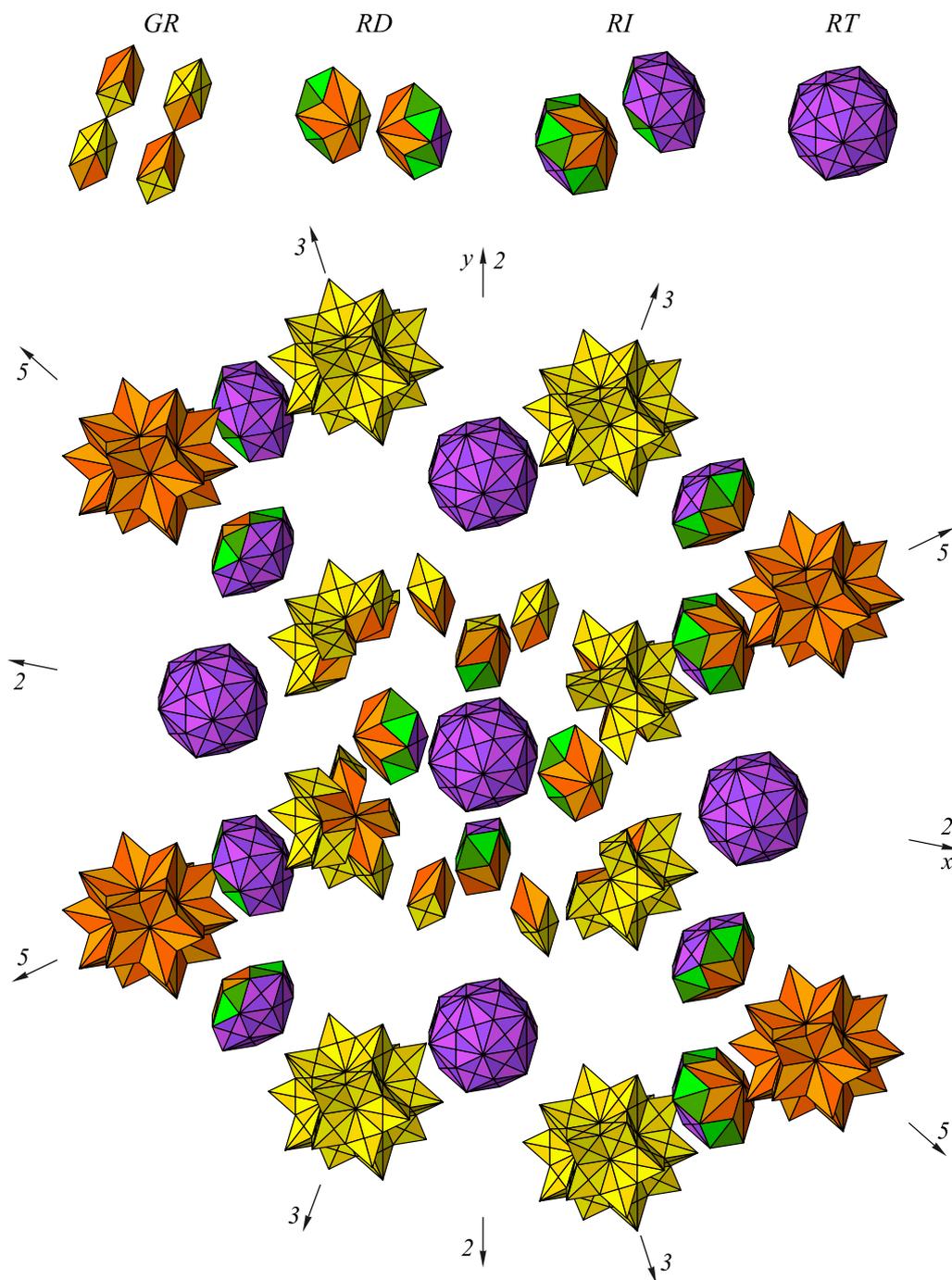
упаковкой  $I$ -типа на базе тетраэдров Данцера. На рис. 6 в центре показан слой упаковки, вырезанный перпендикулярно оси 2-го порядка (оси  $z$ ). Здесь представлен вариант упаковки с узлом  $C$  в центре. Если тетраэдры объединить в зоноэдры, то их пространственное расположение в точности воспроизводит правило подстановок для триаконтаэдра в разбиении Соколара–Стейнхардта.

Заметим, что подход, основанный на выведении зоноэдрального разбиения из тетраэдрического, помимо упрощения алгоритма построения упаковки, значительно упрощает также последующую процедуру заселения ячеек атомами.

Обратим еще раз внимание на чередование правых и левых тетраэдров. При построении упаковки зоноэдров с использованием набора  $\{a, c, k, K\}$  правые тетраэдры всегда соседствуют с левыми — как при их объединении в зоноэдры, так и при объединении зоноэдров в глобальную упаковку. Это свойство накладывает дополнительные ограничения на варианты декорирования ячеек атомами, поскольку в этом случае помимо локальной симметрии зоноэдров должны также учитываться правила локального соответствия (*local matching rules*) между соприкасающимися гранями. Если же, допустим, перед нами стоит задача построения натуральных моделей различных икосаэдрических упаковок, то это свойство позволяет при сборке субъединиц использовать принцип „штекер–гнездо“. Появляется возможность построения моделей сложных квазикристаллических упаковок по принципу детского конструктора. Упаковке также можно сопоставить двудольный граф и методами теории графов вывести полезные следствия.

#### 5. Результаты и их обсуждение

Настоящая работа является второй в серии работ по теории строения икосаэдрических квазикристаллов. В предыдущей работе [2] нами была подробно пояснена процедура вывода трех основных типов икосаэдрических разбиений путем проецирования из шестимерного пространства и установлена их точная взаимосвязь с тремя типами икосаэдрических квазикристаллов. Было показано, что зоноэдральное разбиение Соколара–Стейнхардта соответствует квазирешетке  $P$ -типа. Все вершины зоноэдров имеют своими прообразами узлы примитивной кубической  $6D$ -решетки, порождаемой шестью единичными базисными векторами — вектором  $[1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]$  и эквивалентными ему векторами, получаемыми циклической перестановкой координат. Обратное неверно — не все узлы в пределах полосы проецирования следуют учитывать при отображении в  $3D$ -пространство во избежание нарушения икосаэдрической симметрии. Все дополнительные узлы квазирешетки  $I$ -типа имеют своими прообразами узлы кубической  $6D$ -подрешетки, сдвинутой на вектор  $[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}]$ . Дополнительные узлы квазирешетки  $F$ -типа имеют своими прообразами узлы подрешеток, сдвинутых на вектор  $[\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0\ 0\ 0\ 0]$  и экви-



**Рис. 6.** Связь между разбиением Соколара–Стейнхардта на золотые зоноэдры и разбиениями на основе тетраэдров Данцера. Вверху: тетраэдры  $\{a, c, k, K\}$ , сгруппированные вокруг общей вершины  $C$ , образуют зоноэдры  $\{GR, RD, RI, RT\}$ . В центре: точное соответствие между правилами подстановок для зоноэдров и упаковкой  $I$ -типа на базе тетраэдров Данцера. Показан слой упаковки, вырезанный перпендикулярно оси 2-го порядка (вариант упаковки с узлом  $C$  в центре). Тетраэдры объединены в зоноэдры. Пространственное расположение зоноэдров в точности воспроизводит правило подстановок для триаконтаэдра в разбиении Соколара–Стейнхардта. Стрелки обозначают оси симметрии 2-го, 3-го и 5-го порядков и иллюстрируют их расположение по отношению к координатным осям  $x$  и  $y$ , ось  $z$  направлена перпендикулярно слою.

валентные сдвиги. Квазирешеткам  $I$  и  $F$  соответствуют два тетраэдрических разбиения Данцера с базовыми наборами  $\{a, c, k, K\}$  и  $\{a, b, c, k\}$ , соответственно. Таким образом, подход, основанный на теории разбиений,

отнодью не противоречит методам многомерной кристаллографии, а является его неотъемлемой частью.

Известные утверждения о якобы полной взаимной эквивалентности упаковок зоноэдров и упаковок тетра-

эдров [9,38] могут привести неподготовленного читателя к ошибочным выводам. В рамках концепции взаимной выводимости [39] подразумевается не истинная эквивалентность, а лишь то, что полиэдры одного из разбиений могут быть рассечены на части меньшего размера, которые затем могут быть заново сгруппированы в полиэдры второго разбиения. В этом смысле гцк-решетка действительно может быть выведена из примитивной, а результат проецирования одной — из результата проецирования другой. В качестве еще одного наглядного контрпримера можно привести сетку кагомэ, в которой шестиугольники можно рассечь на части, и пары отсеченных треугольников объединить с парами равносторонних треугольников. Получится ромбическая сетка с чередующимися в шахматном порядке прямоугольниками — центрированными и пустыми. Пара плоских сеток с принципиально отличающимися симметриями удовлетворяет всем требованиям взаимной локальной выводимости, что, однако, вовсе не означает их эквивалентности.

Сформулируем важный тезис. В основе процедуры построения всех рассмотренных нами разбиений лежит итерационный алгоритм инфляций и дефляций. Как следствие, они обладают всеми свойствами, присущими разбиениям такого типа [29]. Любые утверждения, справедливые по отношению к результату 1-й итерации, могут быть распространены на достаточно большую область конечных размеров и элементарно доказаны по индукции.

Некоторые осложнения могут возникнуть в случае так называемых „несовершенных“ правил подстановок. Плитки увеличенного размера по-прежнему заполняются плитками исходного размера, но они могут накрывать соответствующие области не полностью, либо частично выходить за их границы. Ячейки, расположенные на границах суперъячеек, генерируются по несколько раз, а общая граница генерируемой области после нескольких итераций приобретает фрактальный характер. Возникающие при этом проблемы несложно решить алгоритмически: после каждой итерации в списке ячеек следует отбрасывать дублирующие элементы, а также ячейки, выходящие за пределы увеличенной области целиком. Разбиение Пенроуза являет собой наиболее известный пример инфляционного разбиения с несовершенными правилами. В трехмерном случае правила подстановок для тетраэдров Данцера являются совершенными, а для зоноэдров — несовершенными.

Правила подстановок, выведенные нами для разбиения Соколара–Стейнхардта [22], позже использовались для построения достаточно больших репрезентативных фрагментов икосаэдрических упаковок как нами, так и другими исследователями. Как минимум 3 работы были вынесены редакциями авторитетных научных журналов на обложки соответствующих номеров [40–42], что косвенно можно рассматривать как успешную верификацию используемых нами теоретических концепций, в том числе — независимыми исследователями. В настоящей

работе представлены результаты применения аналогичного подхода к анализу всех известных на сегодняшний день вариантов икосаэдрических упаковок.

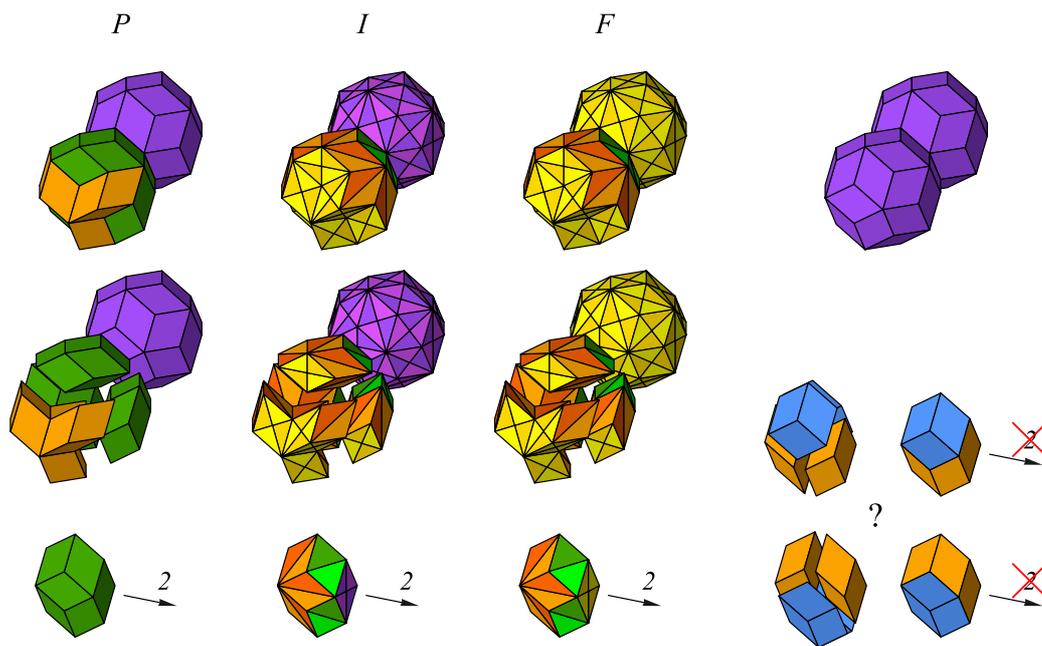
Теперь мы можем сформулировать кардинальные отличия результатов нашего теоретического рассмотрения от широко распространенной модели перекрывающихся кластеров и модели с двумя типами ромбоэдров. Существование характерного структурного мотива из двух (и более) перекрывающихся триконтаэдров было экспериментально установлено при расшифровке структур аппроксимантов. В частности, он характерен для большого класса интерметаллических соединений, различающихся по числу и типу образующих их компонентов — кристаллических 2/1-аппроксимантов. Их структура расшифровывалась в предположении Федоровских пространственных групп  $Pa\bar{3}$  и  $Im\bar{3}$  [43].

Напомним, что структуры аппроксимантов также могут быть получены путем проецирования из пространств более высоких размерностей. Разница лишь в том, что структуры квазикристаллов получаются при проецировании вдоль иррациональных направлений, а аппроксимантов — вдоль близких к ним рациональных направлений [44–46]. Как следствие, аппроксиманты характеризуются близким стехиометрическим составом и схожими структурными мотивами, но представляют собой обычные периодические кристаллы (с достаточно большим числом атомов в элементарной ячейке). Заметим, что в последнее время понятие аппроксиманта трактуется в более широком смысле [47].

Итак, перекрывающиеся икосаэдрические кластеры изначально были обнаружены в кристаллических структурах. Модель перекрывающихся триконтаэдров прекрасно согласуется с периодическим строением кристаллических аппроксимантов, но плохо согласуется с аperiodическим строением квазикристаллов. Ее использование основано на вполне естественной структурной аналогии, но, как показано ниже, приводит к нарушению точной икосаэдрической симметрии на следующих уровнях масштаба.

Рис. 7 наглядно иллюстрирует несовместимость широко используемых на практике структурных моделей с детальным строением всех трех основных икосаэдрических упаковок. С одной стороны, эти модели применяются для подгонки и уточнения структур реальных квазикристаллов при проецировании в рамках многомерного подхода. С другой стороны, все три типа икосаэдрических упаковок также выведены путем проецирования из шестимерного пространства. Итерационный алгоритм инфляций и дефляций значительно упрощает процедуру построения упаковок по сравнению с непосредственным проецированием, но в основе своей он является следствием инфляционной симметрии, т.е. сам по себе он тоже не должен противоречить многомерному подходу.

При сопоставлении модели перекрывающихся триконтаэдров с соответствующими фрагментами упаковки зоноэдров (рис. 7) мы приходим к выводу, что с триконтаэдром соседствует не второй такой же триконтаэдр,



**Рис. 7.** Принципиальные отличия фрагментов 3-х типов икосаэдрических упаковок ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) от соответствующих им характерных фрагментов в модели перекрывающихся кластеров и в моделях, основанных на использовании двух типов ромбоэдров (вытянутого и сплющенного). Вверху: слева — триконтаэдр, объединенный с кластером из трех ромбических додекаэдров Билинского и четырех вытянутых ромбоэдров, показаны способы реализации характерного кластера в упаковках трех типов; справа — соответствующие им два взаимно перекрывающихся триконтаэдра в структурах кристаллических аппроксимантов. Внизу: иллюстрация неоднозначности проецирования и нарушения симметрии при использовании базового набора из двух типов ромбоэдров (вытянутого и сплющенного) на примере додекаэдра Билинского; слева — ромбические додекаэдры в упаковках трех типов, через ромбические додекаэдры проходят локальные оси 2-го порядка; справа — 2 варианта рассечения додекаэдра Билинского на вытянутые и сплющенные ромбоэдры, оба варианта приводят к потере первоначальной симметрии.

перекрывающийся с первым, а кластер из трех ромбических додекаэдров Билинского и четырех вытянутых ромбоэдров. Его форма близка к форме триконтаэдра, но его внутренняя структура и симметрия кардинально отличаются. Он не обладает икосаэдрической симметрией. Попытка отождествить его с триконтаэдром при подгонке реальной структуры должна приводить к понижению симметрии и появлению статистически усредненных „ложных“ позиций со слабой и смешанной заселённостью конкретными атомами. Дальнейшее рассечение зонэдров на тетраэдры Данцера в упаковках  $I$  и  $F$  принципиально ничего не меняет — вторая половина кластера не идентична первой.

Как уже отмечалось, структура икосаэдрических квазикристаллов многими исследователями зачастую рассматривается как разбиение на два типа ромбоэдров — вытянутый и сплющенный (3D-разбиение Пенроуза, разбиение на ромбоэдры Амманна, разбиение Амманна–Крамера–Нери). На фундаментальные проблемы, возникающие при таком подходе, впервые указали Соколар и Стейнхардт: „Он [триконтаэдр] может быть рассечен на 10 вытянутых и 10 сплющенных ромбоэдров многими разными способами, но ни в одном из них полная икосаэдрическая симметрия не сохраняется“ [8]. Позже ими была предпринята попытка построения разбиения

Амманна путем введения контекстно зависимых правил локального соответствия [48].

Приведем достаточно длинную цитату из статьи Штойрера в „*International Tables*“ Международного союза кристаллографов — одном из самых авторитетных источников [3]: „Десять вытянутых и десять сплющенных ромбоэдров могут быть упакованы так, чтобы сформировать ромбический триконтаэдр. Икосаэдрическая симметрия этого зонэдра будет нарушена многими возможными разбиениями на ромбоэдры. Удаление одной зоны из триконтаэдра дает ромбический икосаэдр, состоящий из пяти вытянутых и пяти сплющенных ромбоэдров. Опять, отдельная ось симметрии 5-го порядка ромбического икосаэдра нарушается при разбиении на ромбоэдры. Удаление еще одной зоны дает ромбический додекаэдр, состоящий из двух вытянутых и двух сплющенных ромбоэдров. Удаление последней оставшейся зоны ведет окончательно к одному отдельному вытянутому ромбоэдру. Используя эти зонэдры в качестве элементарных кластеров, можно вывести правила локального соответствия для построения 3D разбиения Пенроуза.“ Удивительно, но факт — в структурном анализе квазикристаллов десятилетиями используются модели, заведомо несовместимые с икосаэдрической симметрией! И наоборот, модели, в точности воспро-

изводящие локальную и глобальную икосаэдрическую симметрию, в структурных исследованиях практически никогда не использовались.

На рис. 7, *внизу* на примере додекаэдра Билинского поясняется неоднозначность процедуры проецирования и нарушение симметрии в случае использования двух типов ромбоэдров (вытянутого и сплющенного). В упаковке  $P$ -типа ромбический додекаэдр появляется непосредственно как один из зоноэдров базового набора. В упаковках  $I$  и  $F$ -типов он дополнительно рассечен на тетраэдры Данцера соответствующих базовых наборов. Через ромбические додекаэдры проходят локальные оси 2-го порядка. Во всех трех используемых нами упаковках собственная симметрия зоноэдров не нарушается. Справа представлены 2 варианта рассечения додекаэдра Билинского на вытянутые и сплющенные ромбоэдры. Оба варианта приводят к потере первоначальной симметрии — нарушается как локальная симметрия конкретной ячейки или кластера ячеек, так и глобальная икосаэдрическая симметрия упаковки в целом.

Повторим, выбор варианта рассечения зоноэдров на ромбоэдры не определен. Неоднозначность проецирования порождает особый вид дефектов в квазикристаллах — фазоны [49]. В противоположность этому, процесс построения всех трех рассмотренных нами упаковок является полностью детерминированными. На наш взгляд, выбор в пользу моделей с неоднозначным разбиением на субъединицы должен быть обоснован наличием характерных для таких структур свойств — в экспериментах должны наблюдаться реальное понижение симметрии и высокая вероятность коллективных эффектов при „перескоках“ атомов (если они действительно имеют место), что с большой вероятностью должно сопровождаться локальными перестройками на атомарном уровне и образованием вторичной доменной структуры по аналогии с ферроэлектриками.

В следующей работе мы планируем изложить правила заселения ячеек конкретными атомами. Мы предполагаем, что в элементарных ячейках квазикристаллов следует определить позиции общего и частного положения по аналогии с позициями Вайкоффа. Это позволит перейти от рассмотрения упаковок полиэдров к генерации квазипериодических структур с желаемым пространственным распределением атомов и изучением их потенциально возможных физических свойств. Важной частью такого подхода является усреднение по объему с помощью правил подстановок, формализованных для обработки списков ячеек [24].

## Заключение

Икосаэдрические квазикристаллы рассматриваются нами как упаковки элементарных ячеек. В рамках единого подхода анализируются все возможные варианты самоподобных икосаэдрических упаковок. Существует 3 типа икосаэдрических квазикристаллов ( $P$ ,  $I$ ,  $F$ ) —

аналоги примитивной, объемно-центрированной и гра-нецентрированной кубических решеток, соответственно. Для каждого типа возможны центросимметричные и нецентросимметричные формы, для каждой из которых существует по 3 локально-изоморфных варианта.

Нами сделан вывод, что упаковке  $P$ -типа соответствует разбиение Соколара–Стейнхардта на зоноэдры, а упаковкам  $I$ - и  $F$ -типов соответствуют два разных разбиения на основе тетраэдров Данцера. Несмотря на то, что для каждого из этих трех разбиений используется свой базовый набор элементарных ячеек и свои правила подстановок, они являются полностью взаимосогласованными. Квазирешетка  $I$  получается путем добавления дополнительных узлов к квазирешетке  $P$ , а квазирешетка  $F$  — путем добавления узлов к квазирешетке  $I$ . Обратное также верно: некоторые тетраэдры упаковки  $F$  можно определенным образом сгруппировать, так что получится упаковка  $I$ ; в свою очередь, тетраэдры упаковки  $I$  можно сгруппировать в зоноэдры, так что получится упаковка  $P$ .

Полностью формализованы правила подстановок для разбиений  $I$ - и  $F$ -типов на тетраэдры Данцера. Они представляются как списки ячеек с учетом их типа, положения и ориентации. Показано, как построить упаковку зоноэдров  $P$ -типа из упаковки тетраэдров Данцера  $I$ -типа.

Квазикристаллы всех 3-х типов могут как обладать центром инверсии (группа симметрии  $m\bar{3}5$ ), так и не обладать им (группа симметрии  $235$ ). Представлен пример построения нецентросимметричной упаковки  $I$ -типа.

Для каждого типа упаковки возможны по 3 локально-изоморфных варианта, различающихся выбором узла в центре ( $A$ ,  $B$ ,  $C$ ). При построении икосаэдрических упаковок на базе тетраэдров Данцера после каждой итерации 3 локально-изоморфных варианта циклически превращаются друг в друга  $C \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow C$ . Следствием этого является то, что структуры характерных кластеров с центрами в разных узлах, являются взаимозависимыми. Одни и те же структурные мотивы должны повторяться в увеличенном масштабе (в соотношении  $\tau : 1$ ) во всех трех кластерах.

Любой вариант икосаэдрической упаковки любого типа можно сгенерировать из одного единственного тетраэдра (включая упаковку зоноэдров, поскольку она может быть получена из тетраэдрической путем объединения тетраэдров).

## Благодарности

Авторы выражают благодарность С.В. Козыреву и В.А. Мошникову за полезные обсуждения.

## Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда за счет гранта № 23-23-00392, <https://rscf.ru/project/23-23-00392/>.

**Конфликт интересов**

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**Список литературы**

- [1] A.E. Madison. Письма в ЖТФ, 2024, **50** (19), 17 (2024).
- [2] A.E. Madison, П.А. Мадисон. ЖТФ, **94** (12), 2123 (2024).
- [3] W. Steurer, T. Haibach. In: *International Tables for Crystallography Volume B: Reciprocal Space*, ed. by U. Shmueli (Springer, Dordrecht, 2006), v. B, Ch. 4.6, p. 486. DOI: 10.1107/97809553602060000568
- [4] W. Steurer, S. Deloudi. *Crystallography of quasicrystals. Concepts, methods and structures* (Springer, Berlin–Heidelberg, 2009), DOI: 10.1007/978-3-642-01899-2
- [5] S. Hyde, S. Andersson, K. Larsson, Z. Blum, T. Landh, S. Lidin, B.W. Ninham. *The language of shape: The role of curvature in condensed matter physics, chemistry, and biology* (Elsevier, Amsterdam, 1997), DOI: 10.1016/B978-0-444-81538-5.X5000-X
- [6] M. Baake, U. Grimm. *Acta Cryst. A*, **76**, 559 (2020). DOI: 10.1107/S2053273320007421
- [7] M. Senechal. Труды МИАН, **288**, 281 (2015). DOI: 10.1134/S0371968515010203 [M. Senechal. *Proc. Steklov Inst. Math.*, **288**, 259 (2015). DOI: 10.1134/S0081543815010204]
- [8] J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. B*, **34**, 617 (1986). DOI: 10.1103/PhysRevB.34.617
- [9] L. Danzer. *Discrete Math.*, **76**, 1 (1989). DOI: 10.1016/0012-365X(89)90282-3
- [10] L. Danzer, Z. Papadopoulos, A. Talis. *Int. J. Mod. Phys. B*, **7**, 1379 (1993). DOI: 10.1142/S0217979293002389
- [11] P. Kramer, R. Neri. *Acta Cryst. A*, **40**, 580 (1984). DOI: 10.1107/S0108767384001203
- [12] K. Kato, T. Ninomiya. *J. Alloys Compd.*, **342**, 206 (2002). DOI: 10.1016/S0925-8388(02)00180-9
- [13] A. Yamamoto, H. Takakura, A.P. Tsai. *Phys. Rev. B*, **68**, 094201 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevB.68.094201
- [14] H. Takakura, C. Pay Gómez, A. Yamamoto, M. de Boissieu, A.P. Tsai. *Nature Mater.*, **6**, 58 (2007). DOI: 10.1038/nmat1799
- [15] T. Yamada, H. Takakura, H. Euchner, C. Pay Gómez, A. Bosak, P. Fertey, M. de Boissieu. *IUCrJ*, **3**, 247 (2016). DOI: 10.1107/S2052252516007041
- [16] I. Buganski, J. Wolny, H. Takakura. *Acta Cryst. A*, **76**, 180 (2020). DOI: 10.1107/S2053273319017339
- [17] I. Buganski, R. Strzalka, J. Wolny. *Acta Cryst. B*, **80**, 84 (2024). DOI: 10.1107/S2052520624000763
- [18] Л.С. Левитов, Ж. Ринер. Письма в ЖЭТФ, **47** (12), 658 (1988). [http://jetpletters.ru/ps/182/article\\_3109.pdf](http://jetpletters.ru/ps/182/article_3109.pdf) [L.S. Levitov, J. Rhyner. *JETP Lett.*, **47** (12), 760 (1988). [http://jetpletters.ru/ps/1099/article\\_16620.pdf](http://jetpletters.ru/ps/1099/article_16620.pdf)]
- [19] L.S. Levitov, J. Rhyner. *J. Phys. France*, **49**, 1835 (1988). DOI: 10.1051/jphys:0198800490110183500
- [20] P. Kramer, Z. Papadopoulos, D. Zeidler. In: *Symmetries in science V*, ed. by B. Gruber, L.C. Biedenharn, H.D. Doebner (Springer, Boston, 1991), p. 395. DOI: 10.1007/978-1-4615-3696-3\_19
- [21] P. Kramer, Z. Papadopoulos, M. Schlottmann, D. Zeidler. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**, 4505 (1994). DOI: 10.1088/0305-4470/27/13/024
- [22] A.E. Madison. *RSC Adv.*, **5**, 5745 (2015). DOI: 10.1039/C4RA09524C
- [23] A.E. Madison. *RSC Adv.*, **5**, 79279 (2015). DOI: 10.1039/C5RA13874D
- [24] A.E. Мадисон, П.А. Мадисон, В.А. Мошников. ЖТФ, **94** (4), 561 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.04.57526.284-23 [A.E. Madison, P.A. Madison, V.A. Moshnikov. *Tech. Phys.*, **69**, 528 (2024)].
- [25] D.A. Rabson, N.D. Mermin, D.S. Rokhsar, D.C. Wright. *Rev. Mod. Phys.*, **63**, 699 (1991). DOI: 10.1103/RevModPhys.63.699
- [26] D.B. Litvin. *Acta Cryst. A*, **47**, 70 (1991). DOI: 10.1107/S0108767390010054
- [27] A.E. Madison, P.A. Madison. *Struct. Chem.*, **31**, 485 (2020). DOI: 10.1007/s11224-019-01430-w
- [28] Дж. Конвей, Н. Слоэн. *Упаковки шаров, решетки и группы*, в 2-х т., (Мир, М., 1990) [J.H. Conway, N.J.A. Sloane. *Sphere packings, lattices and groups*, 3rd ed. (Springer, NY, 1999), DOI: 10.1007/978-1-4757-6568-7]
- [29] M. Baake, U. Grimm. *Aperiodic order. V. 1: A mathematical invitation* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2013), DOI: 10.1017/CBO9781139025256
- [30] A. Al-Siyabi, N. Ozdes Koca, M. Koca. *Symmetry*, **12**, 1983 (2020). DOI: 10.3390/sym12121983
- [31] L.S. Levitov. *EPL*, **6**, 517 (1988). DOI: 10.1209/0295-5075/6/6/008
- [32] A.E. Madison. *Struct. Chem.*, **26**, 923 (2015). DOI: 10.1007/s11224-014-0559-3
- [33] A.E. Madison. *Struct. Chem.*, **29**, 645 (2018). DOI: 10.1007/s11224-018-1083-7
- [34] S. Pautze. *Symmetry*, **9**, 19 (2017). DOI: 10.3390/sym9020019
- [35] J.H. Conway, C. Radin. *Invent. Math.*, **132**, 179 (1998). DOI: 10.1007/s002220050221
- [36] D. Frettlöh, A.L.D. Say-awen, M.L.A.N. De Las Peñas. *Indag. Math.*, **28**, 120 (2017). DOI: 10.1016/j.indag.2016.11.009
- [37] K. Shea. In: *Design Computing and Cognition '04*, ed. by J.S. Gero (Springer, Dordrecht, 2004), p. 137. DOI: 10.1007/978-1-4020-2393-4\_8
- [38] J. Roth. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **26**, 1455 (1993). DOI: 10.1088/0305-4470/26/7/008
- [39] M. Baake, M. Schlottmann, P.D. Jarvis. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **24**, 4637 (1991). DOI: 10.1088/0305-4470/24/19/025
- [40] A.E. Madison, P.A. Madison. *Proc. Roy. Soc. A*, **475**, 20180667 (2019). DOI: 10.1098/rspa.2018.0667
- [41] S.-Y. Jeon, H. Kwon, K. Hur. *Nat. Phys.*, **13**, 363 (2017). DOI: 10.1038/nphys4002
- [42] L. Casas. *J. Appl. Cryst.*, **53**, 1583 (2020). DOI: 10.1107/S1600576720011772
- [43] T. Yamada, N. Fujita, F. Labib. *Acta Cryst. B*, **77**, 638 (2021). DOI: 10.1107/S2052520621006715
- [44] V.E. Dmitrienko. *Acta Cryst. A*, **50**, 515 (1994). DOI: 10.1107/S0108767393013960
- [45] В.Е. Дмитриенко, В.А. Чижиков. *Кристаллография*, **51**, 593 (2006). [V.E. Dmitrienko, V.A. Chizhikov. *Crystallogr. Rep.*, **51**, 552 (2006). DOI: 10.1134/S106377450604002X]
- [46] S. Lidin. In: *Handbook of solid state chemistry*, ed. by R. Dronskowski, S. Kikkawa, A. Stein (Wiley-VCH, Weinheim, 2017), p. 73. DOI: 10.1002/9783527691036.hscevol1002
- [47] T. Matsubara, A. Koga, A. Takano, Y. Matsushita, T. Dotera. *Nat. Commun.*, **15**, 5742 (2024). DOI: 10.1038/s41467-024-49843-4
- [48] C.T. Hann, J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt. *Phys. Rev. B*, **94**, 014113 (2016). DOI: 10.1103/PhysRevB.94.014113
- [49] M. de Boissieu. *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 6778 (2012). DOI: 10.1039/C2CS35212E

## Приложение

В табл. 4 приведен список элементов симметрии групп  $I$  (первые 60 элементов) и  $I_h$  (все 120 элементов) в порядке, используемом при формализации правил подстановок. Элементы распределены по классам. Используются кристаллографические обозначения элементов симметрии с дополнительной уточняющей информацией в скобках. Цифры в скобках для осей 2-го, 3-го и 5-го порядков обозначают конкретные ребра, грани и вершины, через которые эти оси проходят, а для плоскостей зеркального отражения — одну из пар вершин, преобразующихся друг в друга при отражении. В следующих столбцах таблицы приводятся соответствующие элементам симметрии циклические перестановки вершин икосаэдра для принятого в статье порядка их нумерации, и матрицы поворота для принятой в статье установки координатных осей. Используются сокращенные обозначения:  $u = (\sqrt{5} + 1)/4 = \tau/2$ ,  $v = (\sqrt{5} - 1)/4 = \tau^{-1}/2$ , где  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$  — золотое сечение.

Матрицы поворотов получены стандартными методами теории групп и теории представлений. Вся совокупность матриц образует координатное представление группы  $I_h$ . Как обычно, тождественному элементу соответствует единичная матрица, а все матрицы являются ортогональными, следовательно, для любого элемента симметрии определитель матрицы равен  $\pm 1$ . Первые 60 элементов являются собственными вращениями. Для них определитель равен 1. Остальные 60 элементов являются несобственными вращениями (*improper rotations, roto reflections*). Для них определитель равен  $-1$ . При реализации алгоритма построения упаковки перемножать матрицы не требуется, достаточно знать таблицу умножения группы. Матрицы поворотов в явном виде нужны для вычисления координат атомов после декорирования ячеек.

Таблица 4. Элементы симметрии групп  $I$  и  $I_h$

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
1	$E$	1	(1)(2)(3)(4)(5)(6)(7)(8)(9)(10)(11)(12)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
2	$C_5(1)$	5(1)	(1)(2 6 5 4 3)(7 11 10 9 8)(12)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & v \\ u & v & -1/2 \\ v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
3	$C_5(2)$	5(2)	(1 3 7 11 6)(2)(4 8 12 10 5)(9)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & -v \\ u & v & 1/2 \\ -v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
4	$C_5(3)$	5(3)	(1 4 8 7 2)(3)(5 9 12 11 6)(10)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & u \\ 1/2 & u & v \\ -u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
5	$C_5(4)$	5(4)	(1 5 9 8 3)(2 6 10 12 7)(4)(11)	$\begin{pmatrix} u & v & 1/2 \\ v & 1/2 & -u \\ -1/2 & u & v \end{pmatrix}$
6	$C_5(5)$	5(5)	(1 6 10 9 4)(2 11 12 8 3)(5)(7)	$\begin{pmatrix} u & -v & -1/2 \\ -v & 1/2 & -u \\ 1/2 & u & v \end{pmatrix}$
7	$C_5(6)$	5(6)	(1 2 11 10 5)(3 7 12 9 4)(6)(8)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & -u \\ 1/2 & u & -v \\ u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
8	$C_5^4(1)$	5 <sup>4</sup> (1)	(1)(2 3 4 5 6)(7 8 9 10 11)(12)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & v \\ -u & v & 1/2 \\ v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
9	$C_5^4(2)$	5 <sup>4</sup> (2)	(1 6 11 7 3)(2)(4 5 10 12 8)(9)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & -v \\ -u & v & -1/2 \\ -v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
10	$C_5^4(3)$	5 <sup>4</sup> (3)	(1 2 7 8 4)(3)(5 6 11 12 9)(10)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & -u \\ -1/2 & u & v \\ u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
11	$C_5^4(4)$	5 <sup>4</sup> (4)	(1 3 8 9 5)(2 7 12 10 6)(4)(11)	$\begin{pmatrix} u & v & -1/2 \\ v & 1/2 & u \\ 1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
12	$C_5^4(5)$	5 <sup>4</sup> (5)	(1 4 9 10 6)(2 3 8 12 11)(5)(7)	$\begin{pmatrix} u & -v & 1/2 \\ -v & 1/2 & u \\ -1/2 & -u & v \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
13	$C_5^4(6)$	$5^4(6)$	(1 5 10 11 2)(3 4 9 12 7)(6)(8)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & u \\ -1/2 & u & -v \\ -u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
14	$C_5^2(1)$	$5^2(1)$	(1)(2 5 3 6 4)(7 10 8 11 9)(12)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & u \\ 1/2 & -u & -v \\ u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
15	$C_5^2(2)$	$5^2(2)$	(1 7 6 3 11)(2)(4 12 5 8 10)(9)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & -u \\ 1/2 & -u & v \\ -u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
16	$C_5^2(3)$	$5^2(3)$	(1 8 2 4 7)(3)(5 12 6 9 11)(10)	$\begin{pmatrix} -u & -v & 1/2 \\ v & 1/2 & u \\ -1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
17	$C_5^2(4)$	$5^2(4)$	(1 9 3 5 8)(2 10 7 6 12)(4)(11)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & v \\ u & -v & -1/2 \\ -v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
18	$C_5^2(5)$	$5^2(5)$	(1 10 4 6 9)(2 12 3 11 8)(5)(7)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & -v \\ -u & -v & -1/2 \\ v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
19	$C_5^2(6)$	$5^2(6)$	(1 11 5 2 10)(3 12 4 7 9)(6)(8)	$\begin{pmatrix} -u & -v & -1/2 \\ v & 1/2 & -u \\ 1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
20	$C_5^3(1)$	$5^3(1)$	(1)(2 4 6 3 5)(7 9 11 8 10)(12)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & u \\ -1/2 & -u & v \\ u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
21	$C_5^3(2)$	$5^3(2)$	(1 11 3 6 7)(2)(4 10 8 5 12)(9)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & -u \\ -1/2 & -u & -v \\ -u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
22	$C_5^3(3)$	$5^3(3)$	(1 7 4 2 8)(3)(5 11 9 6 12)(10)	$\begin{pmatrix} -u & v & -1/2 \\ -v & 1/2 & u \\ 1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
23	$C_5^3(4)$	$5^3(4)$	(1 8 5 3 9)(2 12 6 7 10)(4)(11)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & -v \\ u & -v & 1/2 \\ v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
24	$C_5^3(5)$	$5^3(5)$	(1 9 6 4 10)(2 8 11 3 12)(5)(7)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & v \\ -u & -v & 1/2 \\ -v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
25	$C_5^3(6)$	$5^3(6)$	(1 10 2 5 11)(3 9 7 4 12)(6)(8)	$\begin{pmatrix} -u & v & 1/2 \\ -v & 1/2 & -u \\ -1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
26	$C_3(132)$	$3(132)$	(1 3 2)(4 7 6)(5 8 11)(9 12 10)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & v \\ u & -v & 1/2 \\ -v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
27	$C_3(143)$	$3(143)$	(1 4 3)(2 5 8)(6 9 7)(10 12 11)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
28	$C_3(154)$	$3(154)$	(1 5 4)(2 10 8)(3 6 9)(7 11 12)	$\begin{pmatrix} u & -v & 1/2 \\ v & -1/2 & -u \\ 1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
29	$C_3(165)$	$3(165)$	(1 6 5)(2 10 4)(3 11 9)(7 12 8)	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
30	$C_3(126)$	$3(126)$	(1 2 6)(3 11 5)(4 7 10)(8 12 9)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & -v \\ u & -v & -1/2 \\ v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
31	$C_3(237)$	$3(237)$	(1 8 11)(2 3 7)(4 12 6)(5 9 10)	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
32	$C_3(387)$	$3(387)$	(1 9 11)(2 4 12)(3 8 7)(5 10 6)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & u \\ -1/2 & u & v \\ -u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
33	$C_3(348)$	3(348)	(1 9 7)(2 5 12)(3 4 8)(6 10 11)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & u \\ 1/2 & u & -v \\ -u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
34	$C_3(498)$	3(498)	(1 10 7)(2 6 11)(3 5 12)(4 9 8)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
35	$C_3(459)$	3(459)	(1 10 8)(2 11 7)(3 6 12)(4 5 9)	$\begin{pmatrix} u & v & -1/2 \\ -v & -1/2 & -u \\ -1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
36	$C_3^2(132)$	$3^2(132)$	(1 2 3)(4 6 7)(5 11 8)(9 10 12)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & -v \\ -u & -v & 1/2 \\ v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
37	$C_3^2(143)$	$3^2(143)$	(1 3 4)(2 8 5)(6 7 9)(10 11 12)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
38	$C_3^2(154)$	$3^2(154)$	(1 4 5)(2 8 10)(3 9 6)(7 12 11)	$\begin{pmatrix} u & v & 1/2 \\ -v & -1/2 & u \\ 1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
39	$C_3^2(165)$	$3^2(165)$	(1 5 6)(2 4 10)(3 9 11)(7 8 12)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
40	$C_3^2(126)$	$3^2(126)$	(1 6 2)(3 5 11)(4 10 7)(8 9 12)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & v \\ -u & -v & -1/2 \\ -v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
41	$C_3^2(237)$	$3^2(237)$	(1 11 8)(2 7 3)(4 6 12)(5 10 9)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
42	$C_3^2(387)$	$3^2(387)$	(1 11 9)(2 12 4)(3 7 8)(5 6 10)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & -u \\ -1/2 & u & -v \\ u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
43	$C_3^2(348)$	$3^2(348)$	(1 7 9)(2 12 5)(3 8 4)(6 11 10)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & -u \\ 1/2 & u & v \\ u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
44	$C_3^2(498)$	$3^2(498)$	(1 7 10)(2 11 6)(3 12 5)(4 8 9)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
45	$C_3^2(459)$	$3^2(459)$	(1 8 10)(2 7 11)(3 12 6)(4 9 5)	$\begin{pmatrix} u & -v & -1/2 \\ v & -1/2 & u \\ -1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
46	$C_2(12)$	2(12)	(1 2)(3 6)(4 11)(5 7)(8 10)(9 12)	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
47	$C_2(13)$	2(13)	(1 3)(2 4)(5 7)(6 8)(9 11)(10 12)	$\begin{pmatrix} -u & v & 1/2 \\ v & -1/2 & u \\ 1/2 & u & v \end{pmatrix}$
48	$C_2(14)$	2(14)	(1 4)(2 9)(3 5)(6 8)(7 10)(11 12)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & u \\ 1/2 & -u & v \\ u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
49	$C_2(15)$	2(15)	(1 5)(2 9)(3 10)(4 6)(7 12)(8 11)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & u \\ -1/2 & -u & -v \\ u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
50	$C_2(16)$	2(16)	(1 6)(2 5)(3 10)(4 11)(7 9)(8 12)	$\begin{pmatrix} -u & -v & 1/2 \\ -v & -1/2 & -u \\ 1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
51	$C_2(23)$	2(23)	(1 7)(2 3)(4 11)(5 12)(6 8)(9 10)	$\begin{pmatrix} -u & -v & -1/2 \\ -v & -1/2 & u \\ -1/2 & u & v \end{pmatrix}$
52	$C_2(34)$	2(34)	(1 8)(2 9)(3 4)(5 7)(6 12)(10 11)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & v \\ u & v & 1/2 \\ v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
53	$C_2(45)$	2(45)	(1 9)(2 12)(3 10)(4 5)(6 8)(7 11)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
54	$C_2(56)$	$2(56)$	(1 10)(2 9)(3 12)(4 11)(5 6)(7 8)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & v \\ -u & v & -1/2 \\ v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
55	$C_2(26)$	$2(26)$	(1 11)(2 6)(3 10)(4 12)(5 7)(8 9)	$\begin{pmatrix} -u & v & -1/2 \\ v & -1/2 & -u \\ -1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
56	$C_2(27)$	$2(27)$	(1 12)(2 7)(3 11)(4 10)(5 9)(6 8)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & -u \\ -1/2 & -u & v \\ -u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
57	$C_2(37)$	$2(37)$	(1 12)(2 8)(3 7)(4 11)(5 10)(6 9)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & -v \\ -u & v & 1/2 \\ -v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
58	$C_2(38)$	$2(38)$	(1 12)(2 9)(3 8)(4 7)(5 11)(6 10)	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
59	$C_2(48)$	$2(48)$	(1 12)(2 10)(3 9)(4 8)(5 7)(6 11)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & -v \\ u & v & -1/2 \\ -v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
60	$C_2(49)$	$2(49)$	(1 12)(2 11)(3 10)(4 9)(5 8)(6 7)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & -u \\ 1/2 & -u & -v \\ -u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
61	$C_i$	$\bar{1}$	(1 12)(2 9)(3 10)(4 11)(5 7)(6 8)	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
62	$S_{10}^7(1)$	$\bar{3}(1)$	(1 12)(2 8 5 11 3 9 6 7 4 10)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & -v \\ -u & -v & 1/2 \\ -v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
63	$S_{10}^7(2)$	$\bar{3}(2)$	(1 10 7 4 6 12 3 5 11 8)(2 9)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & v \\ -u & -v & -1/2 \\ v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
64	$S_{10}^7(3)$	$\bar{3}(3)$	(1 11 8 5 2 12 4 6 7 9)(3 10)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & -u \\ -1/2 & -u & -v \\ u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
65	$S_{10}^7(4)$	$\bar{3}(4)$	(1 7 9 6 3 12 5 2 8 10)(4 11)	$\begin{pmatrix} -u & -v & -1/2 \\ -v & -1/2 & u \\ 1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
66	$S_{10}^7(5)$	$\bar{3}(5)$	(1 8 10 2 4 12 6 3 9 11)(5 7)	$\begin{pmatrix} -u & v & 1/2 \\ v & -1/2 & u \\ -1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
67	$S_{10}^7(6)$	$\bar{3}(6)$	(1 9 11 3 5 12 2 4 10 7)(6 8)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & u \\ -1/2 & -u & v \\ -u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
68	$S_{10}^3(1)$	$\bar{3}^{\circ}(1)$	(1 12)(2 10 4 7 6 9 3 11 5 8)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & -v \\ u & -v & -1/2 \\ -v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
69	$S_{10}^3(2)$	$\bar{3}^{\circ}(2)$	(1 8 11 5 3 12 6 4 7 10)(2 9)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & v \\ u & -v & 1/2 \\ v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
70	$S_{10}^3(3)$	$\bar{3}^{\circ}(3)$	(1 9 7 6 4 12 2 5 8 11)(3 10)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & u \\ 1/2 & -u & -v \\ -u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
71	$S_{10}^3(4)$	$\bar{3}^{\circ}(4)$	(1 10 8 2 5 12 3 6 9 7)(4 11)	$\begin{pmatrix} -u & -v & 1/2 \\ -v & -1/2 & -u \\ -1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
72	$S_{10}^3(5)$	$\bar{3}^{\circ}(5)$	(1 11 9 3 6 12 4 2 10 8)(5 7)	$\begin{pmatrix} -u & v & -1/2 \\ v & -1/2 & -u \\ 1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
73	$S_{10}^3(6)$	$\bar{3}^{\circ}(6)$	(1 7 10 4 2 12 5 3 11 9)(6 8)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & -u \\ 1/2 & -u & v \\ u & v & -1/2 \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
74	$S_{10}^9(1)$	$\bar{5}^7(1)$	(1 12)(2 7 3 8 4 9 5 10 6 11)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & -u \\ -1/2 & u & v \\ -u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
75	$S_{10}^9(2)$	$\bar{5}^7(2)$	(1 5 6 10 11 12 7 8 3 4)(2 9)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & u \\ -1/2 & u & -v \\ u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
76	$S_{10}^9(3)$	$\bar{5}^7(3)$	(1 6 2 11 7 12 8 9 4 5)(3 10)	$\begin{pmatrix} u & v & -1/2 \\ -v & -1/2 & -u \\ 1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
77	$S_{10}^9(4)$	$\bar{5}^7(4)$	(1 2 3 7 8 12 9 10 5 6)(4 11)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & -v \\ -u & v & 1/2 \\ v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
78	$S_{10}^9(5)$	$\bar{5}^7(5)$	(1 3 4 8 9 12 10 11 6 2)(5 7)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & v \\ u & v & 1/2 \\ -v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
79	$S_{10}^9(6)$	$\bar{5}^7(6)$	(1 4 5 9 10 12 11 7 2 3)(6 8)	$\begin{pmatrix} u & v & 1/2 \\ -v & -1/2 & u \\ -1/2 & u & v \end{pmatrix}$
80	$S_{10}(1)$	$\bar{5}^3(1)$	(1 12)(2 11 6 10 5 9 4 8 3 7)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & -u \\ 1/2 & u & -v \\ -u & v & -1/2 \end{pmatrix}$
81	$S_{10}(2)$	$\bar{5}^3(2)$	(1 4 3 8 7 12 11 10 6 5)(2 9)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & u \\ 1/2 & u & v \\ u & -v & -1/2 \end{pmatrix}$
82	$S_{10}(3)$	$\bar{5}^3(3)$	(1 5 4 9 8 12 7 11 2 6)(3 10)	$\begin{pmatrix} u & -v & 1/2 \\ v & -1/2 & -u \\ -1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
83	$S_{10}(4)$	$\bar{5}^3(4)$	(1 6 5 10 9 12 8 7 3 2)(4 11)	$\begin{pmatrix} -1/2 & -u & v \\ -u & v & -1/2 \\ -v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
84	$S_{10}(5)$	$\bar{5}^3(5)$	(1 2 6 11 10 12 9 8 4 3)(5 7)	$\begin{pmatrix} -1/2 & u & -v \\ u & v & -1/2 \\ v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
85	$S_{10}(6)$	$\bar{5}^3(6)$	(1 3 2 7 11 12 10 9 5 4)(6 8)	$\begin{pmatrix} u & -v & -1/2 \\ v & -1/2 & u \\ 1/2 & u & v \end{pmatrix}$
86	$S_6^5(132)$	$\bar{3}(132)$	(1 10 2 12 3 9)(4 5 6 11 7 8)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & -v \\ -u & v & -1/2 \\ v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
87	$S_6^5(143)$	$\bar{3}(143)$	(1 11 3 12 4 10)(2 7 8 9 5 6)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
88	$S_6^5(154)$	$\bar{3}(154)$	(1 7 4 12 5 11)(2 3 8 9 10 6)	$\begin{pmatrix} -u & v & -1/2 \\ -v & 1/2 & u \\ -1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
89	$S_6^5(165)$	$\bar{3}(165)$	(1 8 5 12 6 7)(2 3 4 9 10 11)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
90	$S_6^5(126)$	$\bar{3}(126)$	(1 9 6 12 2 8)(3 4 5 10 11 7)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & v \\ -u & v & 1/2 \\ -v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
91	$S_6^5(237)$	$\bar{3}(237)$	(1 6 11 12 8 4)(2 10 7 9 3 5)	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
92	$S_6^5(387)$	$\bar{3}(387)$	(1 2 11 12 9 4)(3 6 7 10 8 5)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & -u \\ 1/2 & -u & -v \\ u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
93	$S_6^5(348)$	$\bar{3}(348)$	(1 2 7 12 9 5)(3 11 8 10 4 6)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & -u \\ -1/2 & -u & v \\ u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
94	$S_6^5(498)$	$\bar{3}(498)$	(1 3 7 12 10 5)(2 8 11 9 6 4)	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
95	$S_6^5(459)$	$\bar{3}(459)$	(1 3 8 12 10 6)(2 4 7 9 11 5)	$\begin{pmatrix} -u & -v & 1/2 \\ v & 1/2 & u \\ 1/2 & -u & v \end{pmatrix}$
96	$S_6(132)$	$\bar{3}^5(132)$	(1 9 3 12 2 10)(4 8 7 11 6 5)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & v \\ u & v & -1/2 \\ -v & -1/2 & -u \end{pmatrix}$
97	$S_6(143)$	$\bar{3}^5(143)$	(1 10 4 12 3 11)(2 6 5 9 8 7)	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
98	$S_6(154)$	$\bar{3}^5(154)$	(1 11 5 12 4 7)(2 6 10 9 8 3)	$\begin{pmatrix} -u & -v & -1/2 \\ v & 1/2 & -u \\ -1/2 & u & v \end{pmatrix}$
99	$S_6(165)$	$\bar{3}^5(165)$	(1 7 6 12 5 8)(2 11 10 9 4 3)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
100	$S_6(126)$	$\bar{3}^5(126)$	(1 8 2 12 6 9)(3 7 11 10 5 4)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & -v \\ u & v & 1/2 \\ v & 1/2 & -u \end{pmatrix}$
101	$S_6(237)$	$\bar{3}^5(237)$	(1 4 8 12 11 6)(2 5 3 9 7 10)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
102	$S_6(387)$	$\bar{3}^5(387)$	(1 4 9 12 11 2)(3 5 8 10 7 6)	$\begin{pmatrix} v & 1/2 & u \\ 1/2 & -u & v \\ -u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
103	$S_6(348)$	$\bar{3}^5(348)$	(1 5 9 12 7 2)(3 6 4 10 8 11)	$\begin{pmatrix} v & -1/2 & u \\ -1/2 & -u & -v \\ -u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
104	$S_6(498)$	$\bar{3}^5(498)$	(1 5 10 12 7 3)(2 4 6 9 11 8)	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
105	$S_6(459)$	$\bar{3}^5(459)$	(1 6 10 12 8 3)(2 5 11 9 7 4)	$\begin{pmatrix} -u & v & 1/2 \\ -v & 1/2 & -u \\ 1/2 & u & v \end{pmatrix}$
106	$\sigma(38)$	$m(38)$	(1 9)(2 12)(3 8)(4)(5)(6 10)(7)(11)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
107	$\sigma(49)$	$m(49)$	(1 10)(2 11)(3 12)(4 9)(5)(6)(7)(8)	$\begin{pmatrix} u & -v & -1/2 \\ -v & 1/2 & -u \\ -1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
108	$\sigma(37)$	$m(37)$	(1 11)(2)(3 7)(4 12)(5 10)(6)(8)(9)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & -u \\ -1/2 & u & -v \\ -u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
109	$\sigma(48)$	$m(48)$	(1 7)(2)(3)(4 8)(5 12)(6 11)(9)(10)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & -u \\ 1/2 & u & v \\ -u & v & 1/2 \end{pmatrix}$
110	$\sigma(27)$	$m(27)$	(1 8)(2 7)(3)(4)(5 9)(6 12)(10)(11)	$\begin{pmatrix} u & v & -1/2 \\ v & 1/2 & u \\ -1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
111	$\sigma(15)$	$m(15)$	(1 5)(2 10)(3 9)(4)(6)(7 12)(8)(11)	$\begin{pmatrix} u & v & 1/2 \\ v & 1/2 & -u \\ 1/2 & -u & -v \end{pmatrix}$
112	$\sigma(16)$	$m(16)$	(1 6)(2)(3 11)(4 10)(5)(7)(8 12)(9)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & -v \\ -u & -v & -1/2 \\ -v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
113	$\sigma(12)$	$m(12)$	(1 2)(3)(4 7)(5 11)(6)(8)(9 12)(10)	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
114	$\sigma(13)$	$m(13)$	(1 3)(2)(4)(5 8)(6 7)(9)(10 12)(11)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & -v \\ u & -v & 1/2 \\ -v & 1/2 & u \end{pmatrix}$

Таблица 4 (продолжение).

№	Элемент симметрии		Циклическая перестановка	Матрица поворота
115	$\sigma(14)$	$m(14)$	(1 4)(2 8)(3)(5)(6 9)(7)(10)(11 12)	$\begin{pmatrix} u & -v & 1/2 \\ -v & 1/2 & u \\ 1/2 & u & -v \end{pmatrix}$
116	$\sigma(34)$	$m(34)$	(1)(2 5)(3 4)(6)(7 9)(8)(10 11)(12)	$\begin{pmatrix} -v & 1/2 & u \\ 1/2 & u & -v \\ u & -v & 1/2 \end{pmatrix}$
117	$\sigma(26)$	$m(26)$	(1)(2 6)(3 5)(4)(7 10)(8 9)(11)(12)	$\begin{pmatrix} 1/2 & u & v \\ u & -v & -1/2 \\ v & -1/2 & u \end{pmatrix}$
118	$\sigma(45)$	$m(45)$	(1)(2)(3 6)(4 5)(7 11)(8 10)(9)(12)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
119	$\sigma(23)$	$m(23)$	(1)(2 3)(4 6)(5)(7)(8 11)(9 10)(12)	$\begin{pmatrix} 1/2 & -u & v \\ -u & -v & 1/2 \\ v & 1/2 & u \end{pmatrix}$
120	$\sigma(56)$	$m(56)$	(1)(2 4)(3)(5 6)(7 8)(9 11)(10)(12)	$\begin{pmatrix} -v & -1/2 & u \\ -1/2 & u & v \\ u & v & 1/2 \end{pmatrix}$