КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2021, том 66, № 6, с. 869–876

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ

УДК 548.1

МИНИМИЗАЦИЯ НАБОРА ПОРОЖДАЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ ФЕДОРОВСКОЙ ГРУППЫ

© 2021 г. А. М. Банару[1,*], В. Р. Широкий[1], Д. А. Банару[2]

[1] *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

[2] *Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия*

**E-mail: banaru@phys.chem.msu.ru*

Поступила в редакцию 15.09.2020 г.
После доработки 29.10.2020 г.
Принята к публикации 29.10.2020 г.

Завершена машинная минимизация подмножеств порождающих элементов (генераторов), перечисленных в Интернациональных таблицах кристаллографии, для всех 230 федоровских групп. Проведен анализ полученных минимальных наборов с использованием элементов теории нечетких множеств. По результатам минимизации обнаружено всего восемь федоровских групп, для которых минимальный набор порождающих элементов совпадает с исходным. Предложена классификация федоровских групп по структуре нечетких порождающих наборов.

DOI: 10.31857/S0023476121060047

ВВЕДЕНИЕ

Согласно Р.В. Галиулину [1], “в каждой кристаллической структуре можно выделить конечное число связей, ответственных за ее образование. Вопрос о возникновении кристалла можно решать только на основе химических связей”. Этот вывод был сделан в результате многолетнего исследования свойств (r,R)-систем, или систем Делоне, в которых расстояние от любой точки системы до ближайшей точки этой же системы не меньше некоторого r, а расстояние от любой точки пространства до ближайшей точки системы не больше некоторого R. Кристалл представляет собой правильную (r,R)-систему, в которой каждая точка равно окружена всеми другими ее точками. Сравнительно недавно Н.П. Долбилин, тоже ученик Б.Н. Делоне, нашел радиус правильности для трехмерных кристаллов, т.е. такой радиус кластера, что если все точки равно окружены в пределах этого кластера, то система Делоне правильная. Для локально центросимметричных трехмерных систем радиус правильности составляет $2R$ [2], а в самом общем случае $10R$ [3]. При форме молекул, близкой к сферической, значение $2R$ чаще всего отвечает первой координационной сфере, что было продемонстрировано на примере низших центросимметричных алканов [4], и в этом случае возникновение центросимметричного кристалла обеспечивается равенством первых координационных сфер. В молекулярных кристаллах речь идет о молекулярном координационном числе, а систему Делоне образуют центры масс молекул. Однако если форма молекул далека от сферической, то в первую координационную сферу могут попасть молекулы, отстоящие от исходной на расстояние более чем $2R$, что было продемонстрировано на кристаллических структурах α,ω-диолов [5]. Такие достаточно “далекие” контакты, тем не менее, могут вносить существенный вклад в энергию кристалла.

Каждой паре точек правильной (r,R)-системы, описывающей кристалл, отвечает некоторая операция симметрии, а их совокупность складывается в федоровскую группу. Но, по выражению Р.В. Галиулина, атомы “не знают пространственных групп”, а то, какая именно из федоровских групп реализуется, в конечном счете зависит лишь от симметрии потенциальных функций структурных единиц кристалла [6]. Наиболее прочные химические связи отвечают определенному набору операций симметрии, порождающих федоровскую группу [7], но в силу неопределенности выбора этих связей указанный набор трактуется как нечеткий [8]. Кроме того, неравномерная частотность операций симметрии сказывается на частотности пространственных групп среди минералов [9]. Концепция нечеткости детализирует, но увеличивает трудоемкость топологического анализа, в частности, в молекулярных кристаллах, вынуждая искать так называемые опорные контакты, обеспечивающие трехмерный каркас касаний ван-дер-ваальсовых оболочек молекул, либо анализировать поверхности Хиршфельда или молекулярные полиэдры Вороного–Дирихле [10].

Некоторый набор элементов (подмножество) U группы G называется порождающим, или образующим, если наименьшей подгруппой G, содержащей U и обозначаемой $\langle U \rangle$, является сама G, т.е. $\langle U \rangle = G$. Порождающее множество U называется минимальным, если оно не содержит никакого порождающего множества G, кроме самого себя [11]. Все конечномерные, пусть и бесконечные, кристаллографические группы являются конечнопорожденными, поэтому для каждой из них существует минимальный порождающий набор, причем мощность $|U|$ такого набора конечна. Сравнительно недавно программные алгоритмы были применены к кристаллографическим точечным группам G_0^3 [12] – для вывода всех возможных минимальных наборов генераторов использовалась теорема Кэли об изоморфизме конечных групп и групп перестановок. Также были найдены все комбинаторно различные минимальные наборы для двумерных пространственных (плоских) групп G_2^2 [13]. В случае трехмерных пространственных (федоровских) групп G_3^3 сначала был проведен ручной вывод одного из минимальных наборов для групп трех низших сингоний [14] по методике Э. Лорда [15]. Позже был разработан алгоритм, позволивший минимизировать набор генераторов из тома А Интернациональных таблиц кристаллографии (**ITA**) [16] сначала для групп средних сингоний [17], затем для кубических групп [18]. В настоящей работе этот алгоритм применен к оставшимся сингониям: триклинной, моноклинной и ромбической. Целью работы было завершить минимизацию наборов порождающих элементов федоровских групп и провести сравнение полученных наборов среди всех 230 групп.

СТЕПЕНЬ НЕЧЕТКОСТИ

Из определения минимального порождающего подмножества U совсем не следует, что мощность $|U|$ одинакова у всех минимальных подмножеств одной группы G. Некоторые порождающие подмножества G не обладают наименьшей возможной мощностью $\min|U|$, потому что в них изначально отсутствует некоторый элемент, включение которого позволило бы еще больше минимизировать U. Например, для точечной группы $6mm$ порождающее подмножество элементов $\{2, 3, m\}$ является минимальным, но поворот шестого порядка даст минимальное подмножество меньшей мощности $\{6, m\}$. Минимальные порождающие подмножества с наименьшим возможным числом элементов называются существенно минимальными [8]. В случае групп G_0^3 в существенно минимальном порождающем подмножестве два или три элемента, в случае групп G_2^2 – два–четыре, для групп G_3^3 – два–шесть [7]. Также известны данные о минимальном числе порождающих элементов кристаллографических групп комплексных отражений в n-мерном аффинном пространстве [19].

Если U – множество элементов u_i, и $\mu_V : U \to [0,1]$, то нечетким подмножеством V в U называется множество вида $\{(u, \mu_V(u)) : u \in U\}$, а $\mu_V(u)$ называют степенью принадлежности u к V [20]. Величина $\mu_V(u) = 0$ означает полную непринадлежность u к V, а $\mu_V(u) = 1$ – его полную принадлежность, и в этом случае u называют четким элементом в V. Множество элементов V, у которых $\mu_V(u) > 0$, называют носителем нечеткого подмножества, а все элементы, у которых $\mu_V(u) = 1$, называют его ядром. Если вести речь о порождающем подмножестве группы, то первое из перечисленного отвечает порождающим элементам U, второе – главным порождающим элементам U. Сумму $M = \sum_{i=1}^{n} \mu_V(u_i)$, где $n = |U|$, называют мощностью, или массой нечеткого подмножества V. Де Лука и Термини [21] ввели понятие степени нечеткости множества, к которой относится энтропия, рассчитываемая по формуле:

$$S(V) = \sum_{i=1}^{n} (-\mu_i \ln \mu_i - (1 - \mu_i) \ln(1 - \mu_i)). \qquad (1)$$

Эта функция монотонно растет на (0, 1/2] и монотонно убывает на [1/2, 1). Энтропия четкого множества считается нулевой. Чтобы сравнивать энтропию нечетких множеств с разным числом элементов, можно использовать нормированную величину S с коэффициентом $1/n$. Еще одной функцией является “геометрическая” степень нечеткости, рассчитываемая через расстояния между нечеткими множествами, например

$$\xi = 1 - 2\sigma(V; V_{0.5}), \qquad (2)$$

где σ – нормированное расстояние Хемминга между подмножеством V и максимально нечетким подмножеством $V_{0.5} = \{(u_i, 0.5)\}$:

$$\sigma(V; W) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\mu_V(u_i) - \mu_W(u_i)|. \qquad (3)$$

Значения S и ξ были рассчитаны для нечетких существенно минимальных порождающих наборов $\{(u_1, \mu_1), (u_2, \mu_2), ..., (u_n, \mu_n)\}$ точечных групп [12] и плоских пространственных групп [13]. Степень принадлежности генерирующего элемента к нечеткому порождающему набору рассчитывали как долю наборов, содержащих данный элемент, от общего числа существенно минимальных порождающих наборов. Однако с федоровскими группами случай иной. Исходные порождающие наборы в ITA [16], к сожалению, не всегда минимизируются до существенно минимальных порождающих наборов, поэтому сравнивать нечеткость таких наборов федоровских групп традиционным способом не вполне корректно. Традиционная оценка усугубляется тем, что в пределах даже одной элементарной ячейки кристалла в действительности находится большое число однотипных, но комбинаторно-различных геометрических образов генераторов группы, вообще не упоминаемых в ITA. Поэтому в [18] и в настоящей работе используется иной подход к оценке нечеткости полученных минимальных наборов.

АЛГОРИТМ

Воспользуемся определениями из [18]. Элементы некоторого порождающего подмножества U группы G, входящие в каждое минимальное подмножество U, порождающее G, называются главными порождающими элементами U. Элементы U, не входящие ни в одно из минимальных подмножеств U, порождающих G, называются непорождающими элементами U. Элементы U, не являющиеся ни главными порождающими, ни непорождающими элементами U, называются резервными порождающими элементами U. При $U = G$ речь идет о главных порождающих, резервных порождающих и непорождающих элементах G. С точки зрения теории нечетких множеств главные порождающие элементы нечеткого набора $\{(u_1, \mu_1), (u_2, \mu_2), ..., (u_n, \mu_n)\}$ отвечают его ядру, а резервные порождающие элементы вместе с главными – его носителю.

Для реализации алгоритма минимизации использован пакет для проведения расчетов в сфере дискретной математики, в особенности теории групп, GAP (Groups, Algorithms, Programming) [22]. Данный пакет носит модульный характер. В работе использовали подключаемые модули Cryst (для проведения вычислений с федоровскими группами) и CrystCat (данные о генераторах федоровских групп в соответствии с ITA).

Так как генераторы в общем случае не коммутируют, а группа является бесконечной, поиск ее генераторов по уже заданным элементам возможен только путем полного перебора всех возможных произведений. На первом шаге на вход принимают N матриц 4×4, являющихся генераторами группы в соответствии с ITA. Из N матриц строится N наборов $N-1$ элементов, в каждом из которых отсутствует один из элементов исходного набора. Из каждого построенного набора генерируется группа. Каждую из полученных групп сравнивают с исходной группой с помощью функции, содержащейся в пакете Cryst. Если группы не тождественны друг другу, исключенный из генерирующего набора элемент является главным порождающим. Полученное таким образом подмножество всех главных порождающих элементов проверяют на минимальность: из них строится группа, которая сравнивается с исходной. Если группы тождественны, то резервные порождающие и непорождающие элементы у группы отсутствуют, и алгоритм заканчивает работу. В противном случае алгоритм переходит к следующему шагу, на котором задействуются элементы исходного набора, не являющиеся главными порождающими. Каждый из этих элементов объединяется с главными порождающими, из объединенного набора генерируется группа и сравнивается с исходной. Если среди сгенерированных групп встречаются группы, эквивалентные исходной, то все такие наборы объявляют минимальными, и алгоритм заканчивает работу. Если минимальные генерирующие наборы на этом этапе не найдены, то из элементов, не являющихся главными порождающими, строят все возможные парные сочетания. Каждая пара также объединяется с главными порождающими, как на предыдущем шаге. Если среди сгенерированных ими групп встречаются группы, эквивалентные исходной, то все такие наборы объявляются минимальными. В противном случае этот шаг повторяется для тройных, четверных и других сочетаний элементов, пока не будет найден хотя бы один минимальный генерирующий набор. Реализованный алгоритм имеет на выходе все минимальные наборы генерирующих элементов симметрии, но не слова, с помощью которых из этих элементов можно получить остальные элементы. Для некоторых групп такие последовательности были выведены вручную при помощи инструментов Кристаллографического сервера Бильбао [23].

Во введении пояснено, что для оценки нечеткости минимальных порождающих наборов, полученных из наборов генераторов ITA, традиционный подход малопригоден, поэтому в настоящей работе использовали другой подход. Если N – мощность исходного (не минимального) порождающего множества U пространственной группы в соответствии с ITA, а $n = |U_{\min}|$ – масса нечеткого (минимального) порождающего подмножества по результатам расчета, то максимально возможное число четких минимальных подмножеств равно числу сочетаний C_N^n. Отношение наблюдаемого числа минимальных порождающих наборов p к этой максимально возможной величине является интегральной характеристикой нечеткости минимизации исходного набора. Близость этого отношения к единице свидетельствует о максимально нечеткой, неоднозначной минимизации исходного набора, близость к нулю говорит об обратном. Величину

$$MS = (1 - p/C_N^n)\times 100\%, \quad (4)$$

где p – общее число полученных минимальных наборов порождающих элементов данной группы, назовем четкостью минимизации исходного набора генераторов группы. Строго говоря, если m – число главных порождающих ($\mu = 1$) элементов U, M – число непорождающих ($\mu = 0$) элементов U, то четкие порождающие наборы могут быть составлены только из $N–M$ элементов, причем m из них обязательно входят в каждый четкий набор. Поэтому максимально возможное число четких порождающих наборов равно C_{N-M}^{n-m}, однако нормировка на C_N^n предпочтительнее, потому что учитывает все элементы в исходном (не минимальном) наборе.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Согласно параграфу 2.2.10 ITA [16] в разделе Generators selected для пространственных групп перечисляются операции симметрии, выбранные для генерирования всех симметрично-эквивалентных точек раздела General position из точки с координатами x, y, z. У всех федоровских групп в качестве первого генератора u_1 выбрано тождественное преобразование E. За ним всегда следуют трансляции $u_2 = t(100) = X$, $u_3 = t(010) = Y$, $u_4 = t(001) = Z$ и, если необходимо, центрирующие трансляции. Последовательность генераторов, следующих за трансляциями, зависит от кристаллического класса и установлена в таблице 8.3.5.1 параграфа 8.3.5 ITA [16]. В ромбической, тетрагональной и кубической сингониях первым в этом списке идет простой либо винтовой поворот второго порядка 2_z. В тетрагональной сингонии за ним всегда следует поворот 4_z, что создает предпосылки для неминимального исходного набора генераторов. Например, в группе $P4_1$ $2_1 \subset 4_1$, что автоматически делает поворот 2_z непорождающим элементом. В кубической сингонии за 2_z в списке генераторов всегда следует 2_y, также 3_{111}. В гексагональной и тригональной сингонии (с гексагональной установкой осей) за трансляциями всегда следует 3_z, причем в гексагональной сингонии далее идет 2_z или m_z. Если класс центросимметричный, то последним элементом в списке генераторов всегда указывается $\bar{1}$. Перечисленные правила выбора генераторов часто провоцируют избыточность их исходного набора.

Рассмотрим пример из таблицы 8.3.5.2 ITA [16]. У группы $P6_122$ в разделе Generators selected семь элементов: $u_1 = E$, $u_2 = X$, $u_3 = Y$, $u_4 = Z$, $u_5 = -y, x - y, z + 1/3$, $u_6 = -x, -y, z + 1/2$, $u_7 = y, x, -z + 1/3$. Пятому и шестому элементам отвечают соответственно винтовые повороты третьего и второго порядков по z. Первых пяти или шести элементов для порождающего набора недостаточно: $\langle u_1, ..., u_5\rangle = P3_1$, $\langle u_1, ..., u_6\rangle = P6_1$, в чем легко убедиться при помощи сервиса IDENTIFY GROUP [23]. Последний генератор $u_7 = y, x, -z + 1/3$ отвечает простому повороту 2_{110}, и $\langle u_1, ..., u_7\rangle = P6_122$. Однако E в этой и любой другой федоровской группе может быть только непорождающим элементом: например, $u_2^{-1}u_2 = u_1$. Фраза “элементы u_i и u_j порождают элемент u_k” означает, что u_k можно представить в виде слова из u_i и u_j, т.е. их некоторого произведения с целыми степенями. Элементы u_i^{-1} и u_j^{-1} порождены u_i и u_j автоматически, поэтому не существует элементов, из которых было бы нельзя сгенерировать E. Элемент u_4, а также один из элементов u_2 и u_3 в данном примере тоже избыточен: $\langle u_2, u_5, u_6, u_7\rangle = \langle u_3, u_5, u_6, u_7\rangle = P6_122$. Иными словами, u_4 – непорождающий, u_2 и u_3 – резервные порождающие элементы, а мощность минимального порождающего набора равна четырем. Однако Э. Лорд [15] пришел к другому результату, так как при ином выборе исходных генераторов эта мощность равна трем: вместо u_5, u_6 и u_7 были выбраны повороты $r_1 = 2_{100}$ и $r_2 = 2_{210}$, для которых $\langle u_2, r_1, r_2\rangle = \langle u_3, r_1, r_2\rangle = P6_122$. Произведение r_1r_2 есть винтовой поворот 6_z, который в списке генераторов ITA вообще отсутствует. Это делает наборы $\{u_2, u_5, u_6, u_7\}$ и $\{u_3, u_5, u_6, u_7\}$ минимальными, но не существенно минимальными.

Исходный порождающий набор ITA минимизируется во всех случаях, кроме восьми пространственных групп низших сингоний: $P1$, $P\bar{1}$, $P2$, Pm, $P2/m$, $P222$, $Pmm2$ и $Pmmm$, имеющих по 3, 4, 4, 4, 5, 5, 5 и 6 порождающих элементов соответственно. Это объясняется отсутствием операций симметрии со сдвигом, которые могли бы сгенерировать трансляции по каким-либо направлениям. Группа $Pmmm$, как было показано в [14], единственная среди федоровских групп, которая имеет наибольшую мощность минимального порождающего набора, равную шести. На рис. 1а перечисленным восьми группам отвечает столбец гистограммы при $\Delta|U| = 0$. Для прочих групп эта величина составляет 1–7, причем $\Delta|U| = 6$ встречается только у кубических групп в классах 432 и $m\bar{3}m$, а $\Delta|U| = 7$ только в классе $m\bar{3}m$. В целом $\Delta|U|$ увеличивается от 0–3 в низших сингониях, до 1–5 в средних сингониях и 3–7 в кубических группах. Единственная группа, не вписывающаяся в эту картину, это $Fdd2$, для которой $\Delta|U| = 5$. Группа $Fdd2$ имеет семь элементов в исходном порождающем наборе ITA и всего два элемента в минимальном наборе (оба являются главными порождающими): поворот 2 вокруг оси z и скользящее отражение d в плоскости $y = 1/8$. Остальные пять элементов – трансляции X, Y, Z, $t(0, 1/2, 1/2)$ и $t(1/2, 0, 1/2)$ – непорождающие.

Число разных минимальных наборов (рис. 1б) для подавляющего большинства групп одно–два: примерно для 96% в низших сингониях, 92% в средних и 64% в кубических группах. Примечательно, что в низших сингониях $N(U_{\min}) = 2$ не встречается, а $N(U_{\min}) = 3$ всего в трех группах: *Pnn*2, *Pnnn* и *Fddd*. Только у этих ортогональных групп полученные минимальные наборы являются в полном смысле нечеткими. Для группы *Pnn*2 исходные генераторы $u_5 = 2_z$ и $u_6 = n$ с координатами $(x,1/4,z)$, генераторы u_1–u_4 стандартные. $Pnn2 = \langle u_5, u_6, u_2\rangle = \langle u_5, u_6, u_3\rangle = \langle u_5, u_6, u_4\rangle$, таким образом, минимальный порождающий набор является нечетким: $\{(u_5, 1), (u_6, 1), (u_2, 1/3), (u_3, 1/3), (u_4, 1/3)\}$. Элементы u_5 и u_6 порождают отражение в плоскости n, параллельной yz, а пара взаимно перпендикулярных n порождает трансляции $X + Z$ и $Y + Z$. Очевидно, что добавление любой трансляции (X, Y или Z) к этим двум породит всю подгруппу трансляций данной федоровской группы. У группы $Pnnn \supset Pnn2$ аналогичная причина нечеткости минимального порождающего набора, с той разницей, что $u_6 = 2_y$ и $u_7 = \bar{1}(1/4,1/4,1/4)$. Полученный нечеткий набор содержит X, Y и Z с той же дробной степенью принадлежности: $\{(u_5, 1), (u_6, 1), (u_7, 1), (u_2, 1/3), (u_3, 1/3), (u_4, 1/3)\}$. У группы *Fddd* $u_5 = t(0, 1/2, 1/2)$, $u_6 = t(1/2, 0, 1/2)$, $u_7 = 2_z$, $u_8 = 2_y$ и $u_9 = \bar{1}(1/8, 1/8, 1/8)$. В дополнение к главным порождающим элементам u_7, u_8 и u_9 порождающему набору необходима одна из пар $\{X,u_5\}$, $\{Y,u_6\}$ или $\{u_5,u_6\}$, в то время как Z является непорождающим элементом, что приводит к нечеткому порождающему набору $\{(u_7, 1), (u_8, 1), (u_9, 1), (u_5, 2/3), (u_6, 2/3), (u_2, 1/3), (u_3, 1/3)\}$.

Наибольшее значение $N(U_{\min}) = 10$ встречается только в группе $Fd\bar{3}$. Это неудивительно, так как $Fd\bar{3}$ является минимальной надгруппой *Fddd* индекса 3 и получается в результате “кубизации” последней. Исходный набор генераторов $Fd\bar{3}$ в отличие от предыдущей группы содержит $u_9 = 3_{111}$ и $u_{10} = \bar{1}(1/8, 1/8, 1/8)$, остальные элементы те же самые. Непорождающие элементы в этой группе отсутствуют, а главными порождающими являются как раз u_9 и u_{10}. Нечеткий порождающий набор имеет довольно громоздкий вид: $\{(u_9, 1), (u_{10}, 1), (u_7, 1/2), (u_8, 1/2), (u_2, 1/5), (u_3, 1/5), (u_4, 1/5), (u_5, 1/5), (u_6, 1/5)\}$.

Главные порождающие элементы найдены во всех группах без исключения. В восьми упомянутых выше группах с $\Delta|U| = 0$ все порождающие элементы главные, более того, эти группы единственные, у которых X, Y и Z – главные порождающие элементы одновременно. На рис. 2 представлено распределение групп по элементам, которые могут встречаться среди главных порождающих, резервных порождающих и непорождающих элементов. К ним относятся трансляции, в том числе центрирующие, а также простые и винтовые повороты второго порядка. Иные элементы всегда являются главными порождающими, к ним относятся $\bar{1}$, повороты 3 и 4, а также все отражения: m, a, c, n и d. Трансляции могут попадать в одну из категорий порождающих элементов в разном сочетании (рис. 2). Так, тройка $\{X, Y, Z\}$ оказывается непорождающей для 95 групп, в то время как только пара $\{X, Y\}$ – для 23 групп, пара $\{Y, Z\}$ – для пяти, а пара $\{X, Z\}$ – для четырех. В отдельности X, Y и Z являются непорождающими соответственно для двух, двух и 43 групп, причем в последнем случае в 32 группах нет иных непорождающих элементов. Такая диспропорция для Z объясняется тем, что в средних сингониях вдоль z направлена ось высшего порядка, и в этом

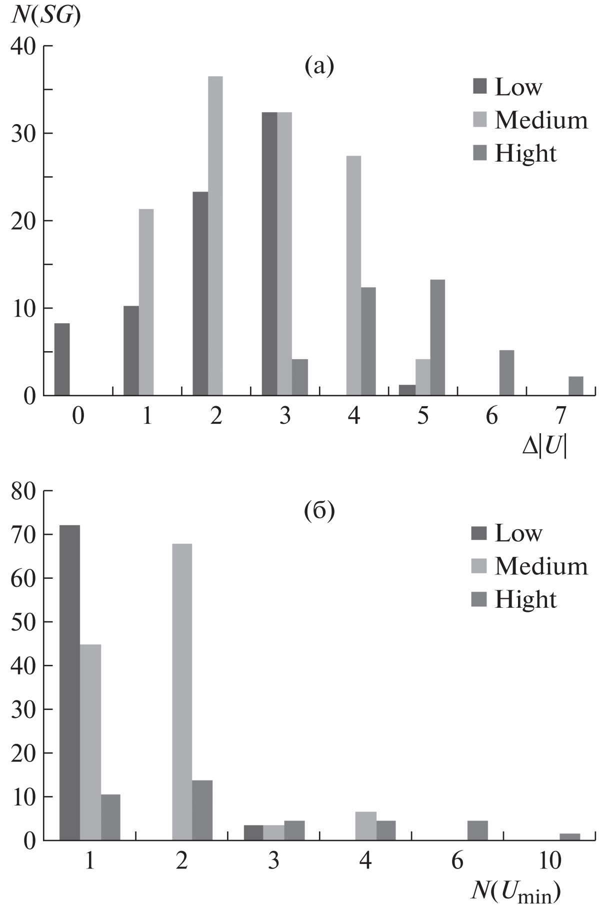

Рис. 1. Число федоровских групп N(SG) в низших (low), средних (medium) и высшей (high) сингониях в зависимости от разности мощностей исходного набора порождающих элементов в ITA и минимального набора (а), числа минимальных наборов (б).

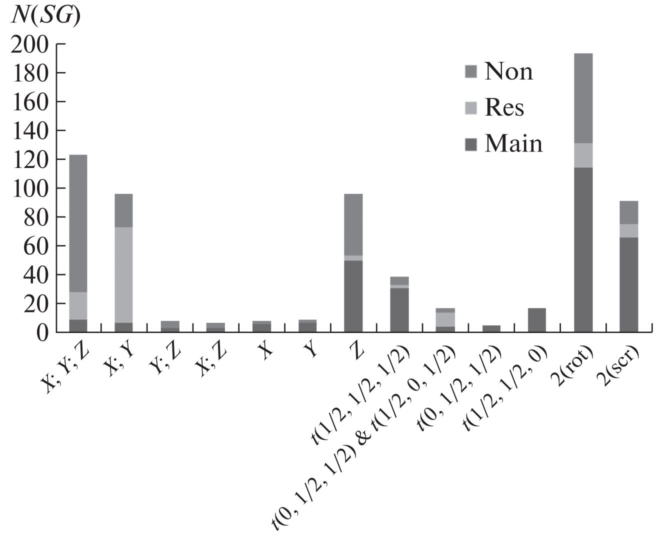

Рис. 2. Число федоровских групп N(SG) в зависимости от наличия операций симметрии среди главных порождающих (Main), резервных порождающих (Res) и непорождающих (Non) элементов; 2(rot) и 2(scr) – простой и винтовой повороты второго порядка.

направлении часто бывает винтовой сдвиг либо скольжение. Однако такая же диспропорция наблюдается и среди главных порождающих элементов: $\{X\}$ – пять групп, $\{Y\}$ – шесть, $\{Z\}$ – 49 групп и даже среди резервных порождающих: $\{X\}$ и $\{Y\}$ – ни одной группы, $\{Z\}$ – три. Причина состоит в том, что в средних сингониях при отсутствии вдоль z винтового сдвига либо скольжения X и Y дублируют друг друга и относятся к одному типу элементов не каждый в отдельности, а попарно. В частности, среди резервных порождающих элементов $\{X, Y\}$ – в 66 группах, а $\{Y, Z\}$ и $\{X, Z\}$ – ни в одной. Центрирующие трансляции $t(1/2, 1/2, 1/2)$ при I-центрировке и $t(0, 1/2, /2)$ вместе с $t(1/2, 0, 1/2)$ при F-центрировке оказываются непорождающими для шести и трех групп соответственно, причем $\{X, Y, Z\}$ для них всегда также непорождающие. Трансляции $t(0, 1/2, 1/2)$ и $t(1/2, 1/2, 0)$ по отдельности (при A- и C-центрировке) – всегда главные порождающие элементы. Вообще, $\{t(1/2, 1/2, 1/2)\}$ и повороты второго порядка чаще бывают главными порождающими, $\{X, Y\}$ и $\{t(0, 1/2, 1/2), t(1/2, 0, 1/2)\}$ – резервными порождающими, $\{X, Y, Z\}$ чаще бывают непорождающими, а $\{Z\}$ – примерно наполовину главным порождающим и непорождающим элементом (рис. 2).

На рис. 3 представлено распределение федоровских групп по четкости минимизации порождающих наборов (MS). Для 192 групп округленное значение $MS = 80\%$ и больше. Это говорит о том, что вклад порождающих элементов в нечеткий минимальный порождающий набор в большинстве групп очень неравномерен. Для восьми групп с $\Delta|U| = 0$ формальное значение $MS = 0$, и для 30 оставшихся групп $MS = 50–80\%$. К нижней границе этого интервала относятся всего две группы: $P3$ и $P3_2$. Обе группы имеют по четыре элемента в исходном порождающем наборе и два различных минимальных набора по три элемента в каждом. В обеих группах нет непорождающих элементов, поворот третьего порядка и Z являются главными порождающими, а X и Y – резервными порождающими: $\{(3, 1), (Z, 1), (X, 1/2), (Y, 1/2)\}$. Таким образом, нечеткие порождающие наборы в этих группах абстрактно одинаковы. Вместе с тем для группы $P3_1 \sim P3_2$ $MS = 65\%$, что требует от-

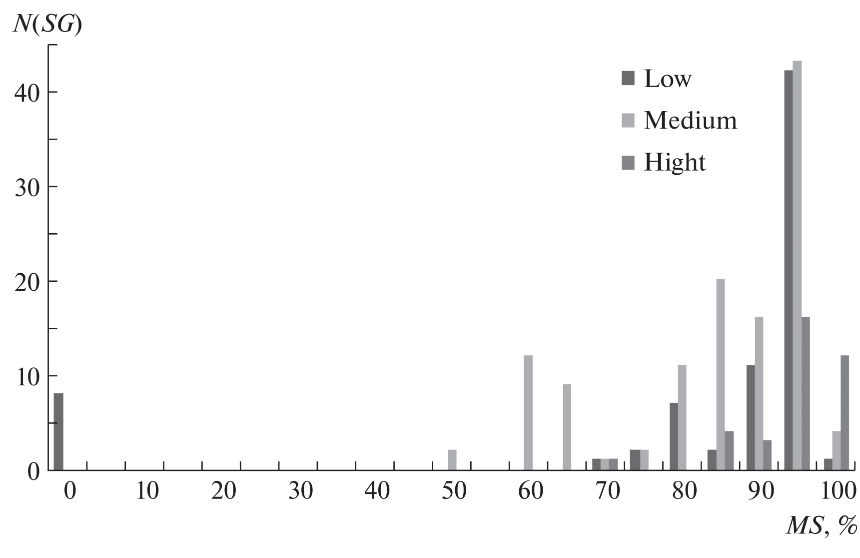

Рис. 3. Число федоровских групп N(SG) в низших (low), средних (medium) и высшей (high) сингониях в зависимости от четкости минимизации MS, округленной с точностью до 5%.

Таблица 1. Абстрактно-различимые типы нечетких порождающих подмножеств федоровских групп по результатам минимизации порождающих множеств ITA

Тип	Масса нечеткого множества	Количество порождающих элементов		Номер группы
		главных	резервных	
1	2	2	0	9, 19, 33, 43, 79, 80, 82, 92, 104, 106, 109, 110, 114, 146, 212, 213
2	2	1	2	76, 144, 198
3	3	3	0	1, 4, 5, 7, 8, 14, 15, 18, 20, 23, 24, 29, 30, 31, 32, 36, 37, 40, 41, 44, 45, 46, 52, 56, 58, 60, 61, 62, 85, 87, 90, 97, 98, 100, 107, 108, 113, 117, 119, 120, 121, 126, 128, 130, 133, 135, 136, 137, 138, 141, 142, 148, 155, 160, 161, 211, 214, 222, 223, 227, 228, 230
4	3	2	2	75, 81, 84, 91, 94, 96, 101, 103, 105, 112, 116, 122, 143, 145, 151, 152, 158, 159, 169, 170, 172, 173, 197, 199, 205, 209, 210, 218, 220
5	3	2	3	34, 86, 102, 118, 207, 208
6	3	2	4	88
7	3	1	4	77, 78, 196
8	3	1	5	195
9	4	4	0	2, 3, 6, 11, 12, 13, 17, 21, 22, 26, 27, 28, 35, 38, 39, 42, 50, 53, 54, 55, 57, 59, 63, 64, 66, 68, 71, 72, 73, 74, 125, 127, 129, 139, 140, 166, 167, 229
10	4	3	2	83, 89, 99, 111, 115, 124, 131, 132, 147, 149, 150, 153, 154, 156, 157, 163, 165, 168, 171, 174, 176, 178, 179, 181, 182, 184, 185, 186, 188, 190, 204, 206, 217, 225, 226
11	4	3	3	48, 221, 224
12	4	3	4	134
13	4	2	4	93, 95, 202, 216, 219
14	4	2	5	200, 201, 215
15	4	2	7	203
16	5	5	0	10, 16, 25, 49, 51, 65, 67, 69
17	5	4	2	123, 162, 164, 175, 177, 180, 183, 187, 189, 192, 193, 194
18	5	3	4	70
19	6	6	0	47
20	6	5	2	191

дельного пояснения. Поворот $3 + 1/3z$ в отличие от $3 + 2/3z$ порождает Z, поэтому в группе $P3_1$ всего один главный порождающий элемент, а Z становится непорождающим: {(3, 1), (X, 1/2), (Y, 1/2)}. Похожая ситуация складывается для всех групп, содержащих поворот третьего, четвертого или шестого порядка с винтовым сдвигом, равным k/n трансляции при $k > 1$ [17].

Совокупность массы нечеткого порождающего набора $M = \sum_{i=1}^{n} \mu_V(u_i)$, где $n = |U|$, и числа главных и резервных порождающих элементов можно использовать как характеристику, разделяющую группы на абстрактно-различимые типы (табл. 1). Для большого числа групп $M = 3$ (102 группы) или 4 (86 групп). Самым распространенным оказывается четкий набор из трех главных порождающих элементов (табл. 1, № 3, 62 группы), от него отстает аналогичный тип с четырьмя главными порождающими элементами (№ 9, 38 групп), затем идут типы № 10 и 4 (35 и 29 групп соответственно). Родоначальником групп типа № 3 можно считать простейшую группу $P1$, групп типа № 9 – другую триклинную группу $P\bar{1}$. К типу № 3 относится довольно много групп средних и высшей сингоний, например $I4/m$, $R\bar{3}$, $Fd\bar{3}m$. Тип № 9, наоборот, представлен весьма скромным количеством групп средних сингоний (семь групп) и всего одной кубической группой $Im\bar{3}m$. По количеству групп низших сингоний типы № 3 и 9 примерно одинаковы (28 и 30 групп соответственно), и в обеих нет гексагональных групп. Группы типов № 10 и 4 относятся только к средним и высшей сингониям. Наглядными представителями типа № 10 являются группы $P4/m$, $P\bar{3}$, $P\bar{6}$. Среди кубических групп к этому типу относятся только некоторые центрированные группы, в частности $Fm\bar{3}m$. Тип № 4 немного проще, к нему относятся такие группы, как $P3$, $P4$, $P\bar{4}$, причем группа $P6$ из-за отсутствия поворота шестого порядка в исходном порождающем наборе относится к типу № 10, а не № 4. Семь типов отвечают одной группе: $Pmmm$, $Fddd$, $I4_1/a$, $P4_2/nnm$, $P6/mmm$, $P23$ и $Fd\bar{3}$. Впрочем, группа $P6/mmm$, как будто бы имеющая шесть элементов в минимальном порождающем наборе, на самом деле должна относиться к тому же типу (№ 17), что и $P4/mmm$, а не происходит это также из-за отсутствия поворота шестого порядка в исходном порождающем наборе. При корректном выборе исходного набора порождающих элементов предложенная типология адекватно отражает сходство нечетких порождающих наборов для федоровских групп с совершенно разной групповой структурой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Галиулин Р.В.* // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. С. 790.
2. *Dolbilin N.* // Struct. Chem. 2016. V. 27. P. 1725.
3. *Baburin I.A., Bouniaev M., Dolbilin N. et al.* // Acta Cryst. A. 2018. V. 74. P. 616.
4. *Банару А.М., Гридин Д.М.* // Журн. структур. химии. 2019. Т. 60. С. 1968.
5. *Банару А.М., Гридин Д.М.* // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 2019. Т. 60. С. 351.
6. *Zorky P.M.* // J. Mol. Struct. 1996. V. 374. P. 9.
7. *Банару А.М.* // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 2009. Т. 50. С. 100.
8. *Банару А.М.* // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 2019. Т. 60. С. 135.
9. *Шабловский Я.О.* // Минералогия. 2019. Т. 5. № 3. С. 3.
10. *Банару А.М., Банару Д.А.* // Журн. структур. химии. 2020. Т. 61. № 10. С. 1567.
11. *Halbeisen L., Hamilton M., Ruzicka P.* // Quaestiones Mathematicae. 2007. V. 30. P. 355.
12. *Banaru A.M.* // Crystallography Reports. 2018. V. 63. P. 1077.
13. *Banaru A.M.* // Crystallography Reports. 2018. V. 63. P. 1071.
14. *Лорд Э.Э., Банару А.М.* // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. 2012. Т. 53. С. 81.
15. *Lord E.* Generators and Relations for Space Groups. Bangalore, 2010.
16. International Tables for Crystallography / Ed. Hahn Th. Volume A. Space-Group Symmetry. Dordrecht: Springer, 2005.
17. *Banaru A.M., Shiroky V.R.* // Crystallography Reports. 2019. V. 64. P. 201.
18. *Banaru A.M., Shiroky V.R.* // Crystallography Reports. 2020. V. 65. P. 417.
19. *Malle G.* // Transformation Groups. 1996. V. 1. P. 259.
20. *Zadeh L.A.* // Information and Control. 1965. V. 8. P. 338.
21. *De Luca A., Termini S.* // Information and Control. 1972. V. 20. P. 301.
22. GAP – a system for computational discrete algebra. http://gap-systems.org
23. *Aroyo M.I., Perez-Mato J.M., Orobengoa D. et al.* // Bulg. Chem. Commun. 2011. V. 43. P. 183.