

НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

УДК 519.688:548.33

**СТРУКТУРНЫЕ КЛАССЫ РЕШЕТЧАТЫХ РАЗБИЕНИЙ ПЛОСКОСТИ
НА ДОДЕКАМИНО**

**Константин Григорьевич Серавкин¹, Константин Альбертович Потехин¹,
Александр Михайлович Банару^{2,3}**

¹ Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых,
Владимир, Россия

² Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва,
Россия

³ Федеральный исследовательский центр «Кольский научный центр» РАН,
Апатиты, Россия

Автор, ответственный за переписку: Александр Михайлович Банару,
banaru@phys.chem.msu.ru

Аннотация. Разбиения плоскости на полимино являются моделью двумерных кристаллических структур из молекул. Созданы каталог и атлас всех 3205 решетчатых разбиений плоскости на додекамино. Обсуждаются структурные закономерности разбиений и их особенности по отношению к молекулярным кристаллам.

Ключевые слова: структурный класс, Браве-разбиение, полимино, полиморфизм

DOI: 10.55959/MSU0579-9384-2-2025-66-3-213-222

Финансирование. Госзадания № 122011300125-2 и № 121031300090-2.

Для цитирования: Серавкин К.Г., Потехин К.А., Банару А.М. Структурные классы решетчатых разбиений плоскости на додекамино // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2025. Т. 66. № 3. С. 213–222.

ORIGINAL ARTICLE

**STRUCTURAL CLASSES OF LATTICE TILINGS OF A PLANE
BY DODECAMINOS**

Konstantin G. Seravkin¹, Konstantin A. Potekhin¹, Aleksandr M. Banaru^{2,3}

¹ Vladimir State University, Stroitelei avenue, 11, 600021 Vladimir, Russia

² Moscow State University, Leninskie Hills, 1/3, 119991 Moscow, Russia

³ Kola Science Centre of RAS, Fersman st., 14, 184209 Apatity, Russia

Corresponding author: Aleksandr M. Banaru, banaru@phys.chem.msu.ru

Abstract. Partitions of a plane into polyominoes are a model of two-dimensional crystal structures made of molecules. The catalog and the atlas of all the 3205 lattice partitions of a plane into dodecaminoes were created. The structural patterns of the partitions and their features in relation to molecular crystals are discussed.

Keywords: structural class, Bravais partition, polyomino, polymorphism

Financial Support. State assignment No. 122011300125-2 and No. 121031300090-2.

For citation: Seravkin K.G., Potekhin K.A., Banaru A.M. Structural Classes of Lattice Tilings of a Plane by Dodecaminos // Vestn. Mosk. un-ta. Ser. 2. Khimiya. 2025. T. 66. № 3. S. 213–222.

Поиск простых и наглядных моделей полиморфизма и полиморфных превращений кристаллов представляет собой важную и актуальную задачу, которой занимаются до сих пор. Например, элементарный акт полиморфных превращений в сплавах металлов может быть представлен как перестановка короткой и длинной диагоналей ромба, вершины которого занимают шары, отвечающие атомам металла [1]. В то время как атомы металла в структурной химии моделируются шарами (не всегда равновеликими и не всегда твердыми), органические молекулы удобно моделировать полимино [2, 3] и поликубами [4, 5].

Решетчатым разбиением плоскости на полимино будем называть такое ее разбиение, в примитивной ячейке которого имеется только одно полимино. По аналогии с решетками Браве в кристаллографии решетчатые разбиения плоскости на полимино можно называть Браве-разбиениями плоскости. А.В. Малеев [2, 3] предложил для построения Браве-разбиений плоскости использовать подрешетки квадратной решетки трансляций и числа в четверичной системе счисления. Решетка трансляций понимается в строгом кристаллографическом смысле как орбита группы трансляций, а подрешетка – орбита одной из ее подгрупп [6]. Разумеется, каждая подрешетка трансляций сама является решеткой.

Массив строго выведенных разбиений при заданных ограничениях на размер полимино и тип разбиения можно использовать в качестве статистического ансамбля для выявления структурных закономерностей. Во-первых, можно исследовать форму и точечную группу симметрии полимино в полученных разбиениях плоскости. Во-вторых, можно определить точечную группу симметрии положения, которое занимает полимино. В-третьих, можно определить плоскую группу симметрии каждого полученного разбиения плоскости. Выведя таким образом структурный класс (СК) [7–10] каждого разбиения, можно исследовать особенности распределения полученных разбиений плоскости по СК.

Можно также исследовать особенности первой координационной сферы полимино. Соседними полимино считаются только такие, между которыми имеется ненулевая граница. Если два полимино имеют только одну общую точку (граница между ними стягивается в точку), то они соседними не считаются. Длину границ между полимино можно измерять числом ребер исходной квадратной решетки трансляций. Отметим, что лишь половина границ в первой координацион-

ной сфере являются независимыми: три из шести для $KЧ = 6$ и две из четырех для $KЧ = 4$.

Длину границ между двумя полимино можно использовать в качестве меры «прочности связи» между моделируемыми ими молекулами. Обозначим длины трех независимых границ для $KЧ = 6$ буквами A , B и C . Тогда при условии $A > 2(B + C)$ можно считать, что «прочность связи» между полимино с границей A существенно превышает «прочность связи» между остальными полимино. Например, для додекамино возможны варианты $(A, B, C) = (11, 1, 1)$ и $(A, B, C) = (10, 2, 1)$. Аналогично для $KЧ = 4$ и $A > 2B$ возможны $(A, B) = (11, 2)$ и $(A, B) = (10, 3)$. Граница между двумя полимино может иметь такую форму, что их невозможно отделить друг от друга, оставаясь в двумерном пространстве. Такую связь между полимино в разбиении плоскости можно уподобить самым прочным супрамолекулярным синтонам [11, 12], в частности, с H -связями в молекулярных слоях органических кристаллов. Варианты границ между полимино будут рассмотрены в следующем разделе. Сами полимино при этом являются моделью оболочек молекул, например ван-дер-ваальсовой поверхности [13], молекулярного полиэдра Вороного – Дирихле [14] или поверхности Хиршфельда [15].

В кристаллохимии широко используется такое понятие как молекулярный агломерат [16–23]. Молекулярные агломераты могут быть островными (нульмерный агломерат), ленточными (одномерный агломерат), плоскими (двумерный агломерат) и каркасными (трехмерный агломерат). Если считать, что длина границы между полимино и ее форма – это геометрическая модель межмолекулярного взаимодействия в кристалле, то аналогично молекулярному агломерату можно рассматривать агломерат из полимино. В решетчатых разбиениях плоскости на полимино могут существовать одномерные агломераты из полимино: полосы и ленты. Границы между полосами – это прямые линии, границы между лентами – это ломаные линии (гофрированные границы). Гофрированные границы между лентами имеют период повторяемости вдоль лент. Трансляционно независимый элемент такой границы может состоять из двух или четырех звеньев ломаной линии. Если в скобках указывать длину звена ломаной линии, то $(1, 1)$ – равномерно гофрированная граница, $(2, 1)$ и $(3, 1)$ – неравномерно гофрированные границы, $(1, 1, 1, 1)$ – граница в виде застезжки-молнии. Варианты границ между лентами из полимино будут рассмотрены также в следующем разделе.

Следует отметить возможность исследования полиморфизма разбиений плоскости на полимино. При сравнении разбиений между собой целесообразно использовать в первую очередь следующие три параметра: 1) решетку трансляций; 2) координационное число (КЧ); 3) форму и длину границ между полимино. Разбиения плоскости, имеющие одинаковые КЧ и границы между полимино в первой координационной сфере, но разные решетки трансляций, назовем *ординарными полиморфами*. Разбиения плоскости, в которых совпадают все три параметра, назовем *разбиениями-близнецами*.

В предыдущей работе обсуждались структурные особенности Браве-разбиений, относящихся к СК cm ; $Z = 2(m)$ [24]. В настоящей работе мы воспользовались алгоритмом для построения Браве-разбиений плоскости на додекамино (полимино из 12 клеток).

Алгоритм

Алгоритм построения Браве-разбиений плоскости начинается с выбора симметрически независимой подрешетки квадратной решетки трансляций. В работе [2] предлагается для каждой выбранной подрешетки указывать координаты базисных векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} одной из примитивных (не обязательно приведенной) ячеек ее решетки трансляций в базисе \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 квадратной решетки трансляций. Вектор \mathbf{a} предлагается направлять вдоль вектора \mathbf{e}_1 . Тогда для вектора \mathbf{a} достаточно указывать только одну координату, а вторая его координата всегда равна нулю. Для вектора \mathbf{b} необходимо указывать обе координаты.

Код подрешетки – запись вида $12\ 1_2$, которая означает, что $\mathbf{a} = 12\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{b} = \mathbf{e}_2 + 2\mathbf{e}_1$. Индекс N подрешетки (в приведенном примере $N = 12$) – число трансляционно независимых квадратных ячеек, проходящихся на элементарную ячейку решетки трансляций этой подрешетки. Число клеток в полимино, которое может реализоваться в Браве-разбиении, полученном с использованием выбранной подрешетки, численно равно индексу этой подрешетки. Например, для построения Браве-разбиений плоскости на додекамино необходимо использовать все симметрически независимые подрешетки с индексом 12. Среди подрешеток при $N = 12$ симметрически независимыми являются только 11 подрешеток: $12\ 1_0$, $12\ 1_1$, $12\ 1_2$, $12\ 1_3$, $12\ 1_4$, $12\ 1_5$, $12\ 1_6$, $6\ 2_0$, $6\ 2_2$, $6\ 2_3$ и $4\ 3_0$. Остальные подрешетки с индексом 12 симметрически эквиваленты перечисленным одиннадцати. Например, подрешетка $12\ 1_{10}$ пре-

образуется в подрешетку $12\ 1_2$ плоскостью зеркального отражения.

После выбора конкретной симметрически независимой подрешетки выполняется анализ массива N -значных чисел в четверичной системе счисления. Каждая цифра такого N -значного числа кодирует число границ и их расположение для очередной трансляционно независимой клетки выбранной подрешетки: 0 – границ нет, 1 – граница слева, 2 – граница сверху и 3 – границы слева и сверху. Трансляционно эквивалентные клетки подрешетки «получают» одинаковые границы. Эти границы клеток подрешетки формируют ломаные линии. Полученные ломаные линии могут быть либо замкнутыми, либо незамкнутыми. Варианты, когда, во-первых, ломаные линии замкнутые и, во-вторых, количество клеток подрешетки в замкнутой области численно равно индексу подрешетки, соответствуют Браве-разбиениям плоскости на полимино. В качестве числового кода полученного решетчатого разбиения плоскости можно использовать N -значное число, для которого выполняются оба указанных условия. Отметим, что числового кода разбиения с указанием подрешетки, для которой он был получен, достаточно для визуализации найденного разбиения плоскости на полимино. Следовательно, можно сформировать атлас (набор изображений) существующих решетчатых разбиений плоскости с заданным индексом подрешетки квадратной решетки трансляций. Порядковый номер разбиения, код подрешетки квадратной решетки трансляций и числовой код разбиения – это элемент каталога разбиений плоскости на полимино. Набор изображений разбиений с указанием элементов каталога – это атлас разбиений плоскости на полимино. Располагая каталогом и атласом разбиений плоскости на полимино, можно переходить к геометрическому (кристаллохимическому) анализу полученных результатов.

Результаты и обсуждение

Разбиение плоскости на полимино является разновидностью двумерных тайлингов. Для вывода всех топологически неодинаковых тайлингов существует общий алгоритм, основанный на использовании символа Делоне [25]. В работе [2] указано, что существуют 3205 вариантов симметрически независимых Браве-разбиений плоскости на додекамино. Пользуясь алгоритмом [2], мы получили эти Браве-разбиения плоскости, составили каталог и атлас (см. приложение по ссылке

<http://www.chem.msu.ru/rus/vmgu/253/213.html>). В каталоге указаны порядковый номер разбиения (от 1 до 3205), код подрешетки квадратной решетки трансляций и числовой код разбиения. В атласе представлены изображения фрагментов полученных нами Браве-разбиений плоскости.

Распределение разбиений по плоским группам представлено в табл. 1. Разбиения представлены лишь 6 из 12 разрешенных групп (гексагональные группы запрещены), потому что условие наличия ровно одного полимино в примитивной ячейке накладывает и собственное ограничение на группу: она должна быть симморфной, иначе орбит с кратностью один у нее не будет. Большинство (2680 вариантов из 3205) Браве-разбиений плоскости на додекамино относится к СК $p1$; $Z = 1(1)$. Следует отметить, что в разбиениях, которые относятся к этому СК, реализуются не только асимметричные полимино, но и зеркально симметричные полимино. В результате зеркально симметричные полимино занимают позицию, точечная группа симметрии которой 1. Между тем в таких Браве-разбиениях плоскости существуют подструктуры, которые относятся к СК pm ; $Z = 1(m)$ или cm ; $Z = 2(m)$. В пределах таких подструктур зеркально симметричное полимино занимает позицию, симметрия которой соответствует его собственной симметрии. На рис. 1 показаны фрагменты трех Браве-разбиений плоскости, которые относятся к СК $p1$; $Z = 1(1)$. В разбиениях № 1433 (рис. 1, *a*) и № 630 (рис. 1, *б*) существуют под-

структуры, которые относятся к cm ; $Z = 2(m)$. Две подструктуры в разбиении № 1433 и три подструктуры в разбиении № 630 (рис. 1, *в*). В разбиении № 1793 существуют три подструктуры, каждая из которых относится к СК pm ; $Z = 1(m)$.

Существенно меньше (443 варианта из 3205) Браве-разбиений плоскости на додекамино относится к СК $p2$; $Z = 1(2)$. В девяти вариантах этих разбиений реализовались додекамино, точечная группа симметрии которых $2mm$, и снова симметрия полимино полностью реализуется только на уровне подструктур Браве-разбиений. Вопрос о существовании аналогичных подструктур в кристаллических структурах молекулярных кристаллов, в которых собственная симметрия молекулы полностью соответствует кристаллографической симметрии, обсуждался в [26]. Так, группа симметрии молекулы $2mm$ совпадает с группой симметрии позиции молекулы в кристалле всего лишь в 6% случаев, а группа симметрии молекулы m – в 26% случаев, т.е. гораздо чаще.

Всего лишь 62 варианта Браве-разбиений плоскости на додекамино относятся к СК cm ; $Z = 2(m)$, 9 вариантов к СК pm ; $Z = 1(m)$, 8 вариантов к СК $c2mm$; $Z = 2(2mm)$ и 3 варианта к СК $p2mm$; $Z = 1(2mm)$. По-видимому, такое малое число вариантов Браве-разбиений плоскости обусловлено малым числом додекамино, способных реализовываться в этих СК.

Среди Браве-разбиений плоскости на додекамино существуют варианты, в которых первая

Т а б л и ц а 1

Плоские группы Браве-разбиений при $N = 12$ с ненулевым числом представителей

№	Решетка	$p1$	$p2$	pm	$p2mm$	cm	$c2mm$	Итого
1	12 1_0	0	0	0	1	0	0	1
2	12 1_1	496	32	0	0	0	0	528
3	12 1_2	430	66	0	0	0	0	496
4	12 1_3	404	72	0	0	0	0	476
5	12 1_4	359	65	0	0	0	0	424
6	12 1_5	219	38	0	0	0	0	257
7	12 1_6	100	21	0	0	21	2	144
8	6 2_0	104	30	4	1	0	0	206
9	6 2_2	203	54	0	0	16	0	139
10	6 2_3	197	33	0	0	25	0	273
11	4 3_0	168	32	5	1	0	6	261
	Итого	2680	443	9	3	62	8	3205

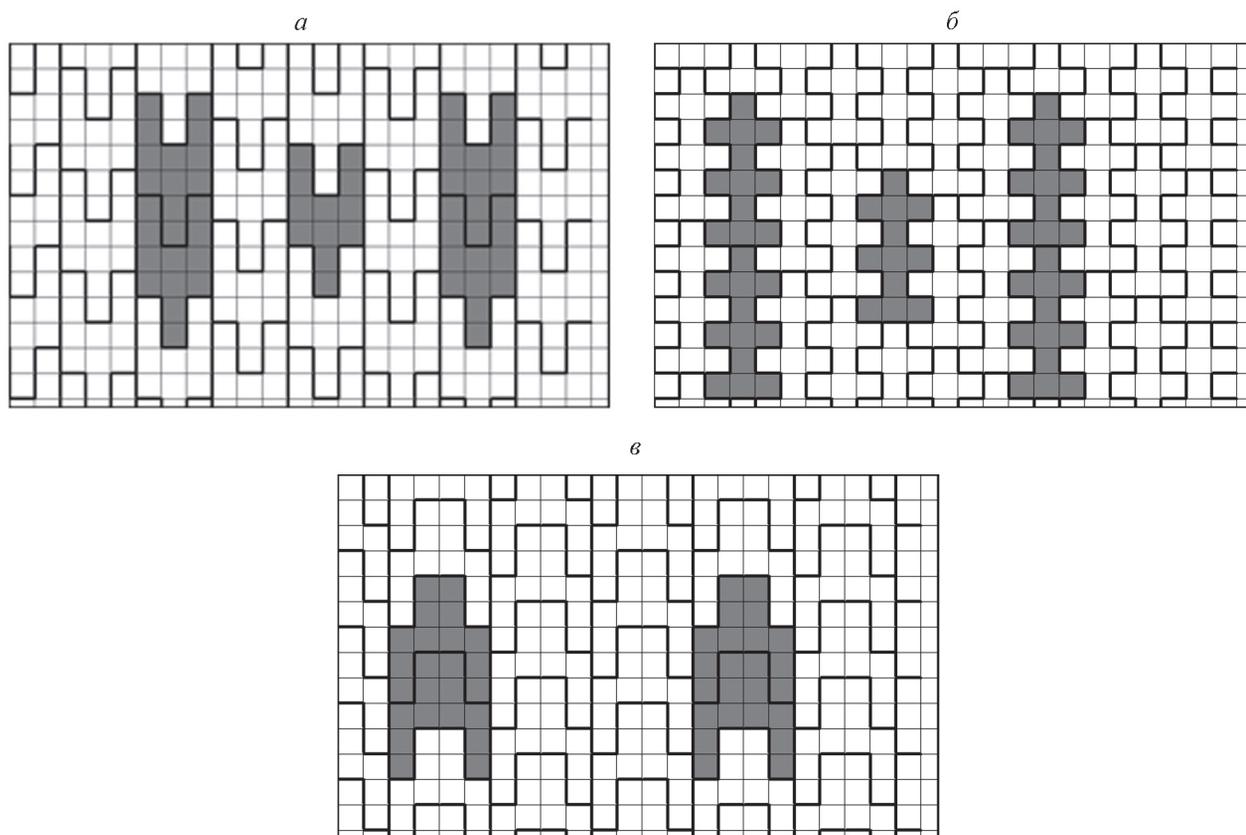


Рис. 1. Разбиения класса p_1 ; $Z = 1(1)$ № 1433 (а), № 630 (б) и № 1793 (в). Закрашен фрагмент одной из подструктур, в которых полимино занимает орбиту m собственной группы симметрии подструктуры

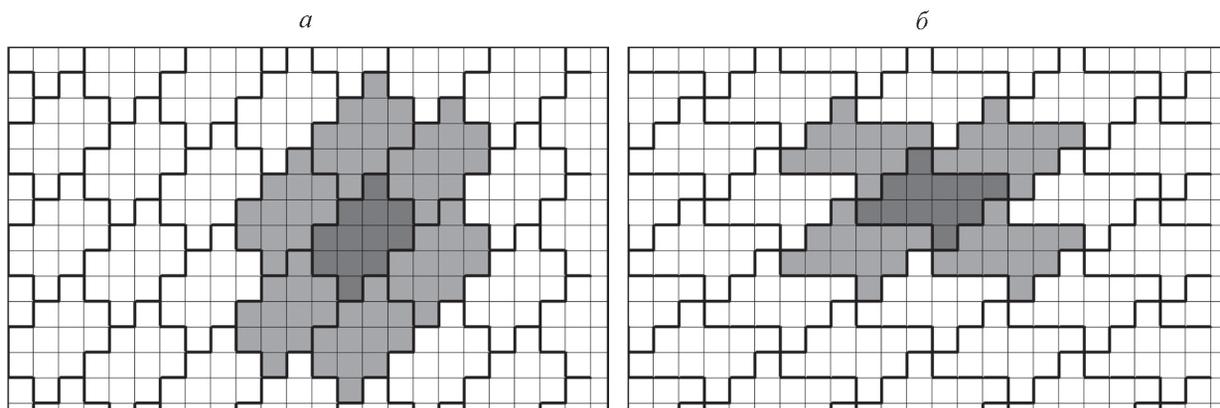


Рис. 2. Фрагменты разбиений № 1501 с КЧ = 6 (а) и № 2852 с КЧ = 4 (б)

координационная сфера базисного полимино состоит из четырех или шести полимино (КЧ = 4 и КЧ = 6). Разбиений с КЧ = 5 не существует. На рис. 2, а, б показаны фрагменты Браве-разбиений плоскости № 1501 (КЧ = 6) и № 2852 (КЧ = 4). Базисные полимино выделены темно-серым цветом, а полимино его первой координационной сферы – светло-серым. В разбиении № 1501 длины границ между базисным полимино и по-

лимино его первой координационной сферы (3, 3, 3), причем границы равны не только по длине, но и совпадают по форме. Следовательно, «прочность связи» между полимино распределена равномерно. Аналогичная ситуация наблюдается и в разбиении № 2852. Браве-разбиения такого вида можно использовать при моделировании и описании молекулярных слоев, близких к шаровым упаковкам. В ретикулярной химии такие структуры

обычно представляются реберно-транзитивной сетью взаимодействий [27–29]. Совсем иная ситуация наблюдается при наличии и длинных, и коротких границ между полимино. На рис. 3, *а*, *б* показаны фрагменты Браве-разбиений № 1442 (КЧ = 6) и № 2233 (КЧ = 4). Длина границ в координационной сфере разбиения № 1442 (9, 3, 1), а в разбиении № 2233 – (11, 2). В первом случае выполняется условие $A > 2(B + C)$, а во втором – $A > 2B$. Выше мы отмечали, что при выполнении этих условий в разбиениях плоскости могут сформироваться агломераты из полимино. В данном случае в разбиении № 1442 (рис. 3, *а*) сформировались ленты. Границы между лентами гофрированные (3, 1). В разбиении № 2233 (рис. 3, *б*) сформировались ленты с прямыми краями (полосы).

Отдельно следует рассмотреть случай, когда «прочность связи» между полимино зависит не только от длины границы между ними, но и от ее формы. На рис. 4, *а*, *б* показаны фрагмен-

ты Браве-разбиений № 2167 (КЧ = 6) и № 3004 (КЧ = 4). Длины границ в координационной сфере разбиения № 2167 такие же, как в разбиении № 1442. Но теперь граница между двумя полимино имеет «механический замок». В результате такие два полимино невозможно разъединить, не вынув предварительно одно из них из общей плоскости. Получается очень устойчивый агломерат из полимино. В данном случае – это лента с равномерно гофрированными границами (1, 1). Аналогичная ситуация наблюдается и в разбиении № 3004 (рис. 4 *б*), только вместо лент формируются полосы. Такие ленты и полосы моделируют молекулярные агломераты, которые возникают прямо в процессе синтеза молекул, например катенаны и ротаксаны [30].

Каждый СК характеризуется собственным числом опорных контактов, т.е. такого наименьшего числа классов симметрически эквивалентных связей какого-либо типа между структурными

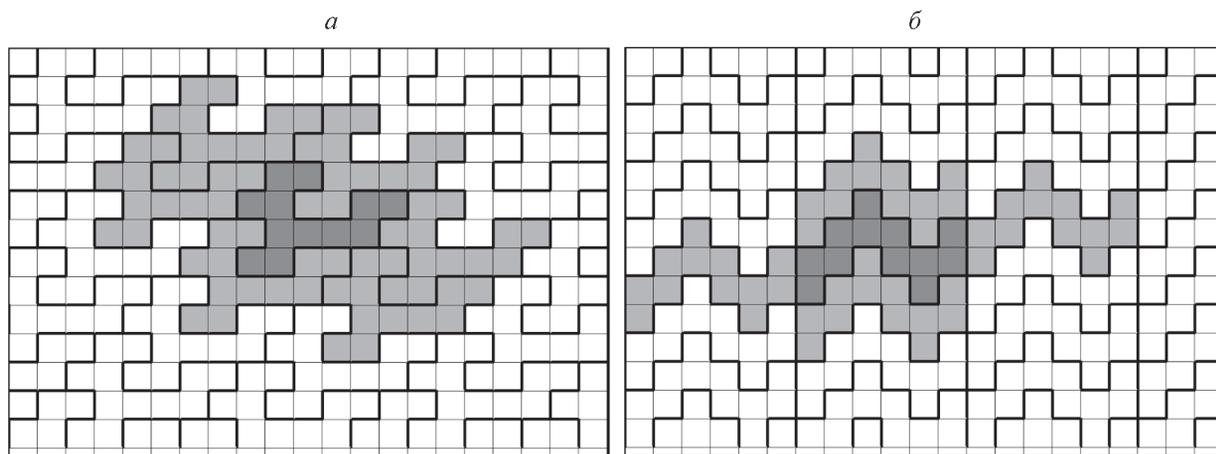


Рис. 3. Фрагменты разбиений № 1442 с КЧ = 6 (*а*) и № 2233 с КЧ = 4 (*б*)

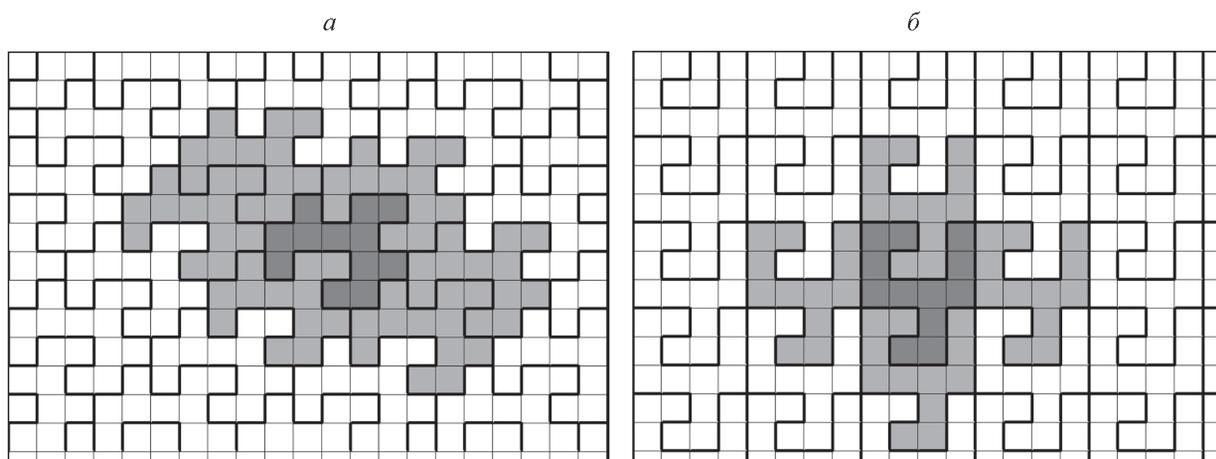


Рис. 4. Фрагменты разбиений № 2167 с КЧ = 6 (*а*) и № 3004 с КЧ = 4 (*б*)

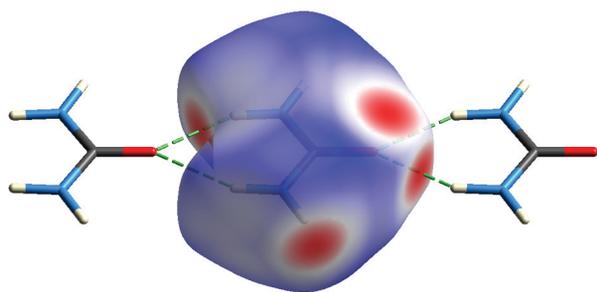


Рис. 5. Фрагмент Н-связанной цепи в структуре мочевины. Показана поверхность Хиршфельда центральной молекулы

единицами, которого достаточно для формирования односвязной структуры [31]. Выбор конкретного набора опорных контактов в структуре, как правило, может быть сделан несколькими способами, но все они характеризуются одинаковым числом классов симметрически эквивалентных контактов, называемым по-другому имплицитной иерархической сложностью структуры (ИHD) [32]. Если контакт входит хотя бы в один из наборов опорных контактов структуры, его называют порождающим, а если не входит ни в один из таких наборов, то он называется непорождающим [33]. Ленты и полосы делятся на два принципиально разных типа с точки зрения порождающих операций симметрии плоской группы Браве-разбиения. Ленты/полосы первого типа имеют внутри себя порождающий контакт между полимино, ленты/полосы второго типа – непорождающий контакт. Например, лента из Н-связанных молекул мочевины [34], относящейся к трехмерному СК $p\bar{4}2_1m$; $Z = 4(2)$ (ИHD = 2) (рис. 5), является лентой первого типа. Пятое правило Полинга (правило парсимонии кристаллических структур) [35] предполагает, что ленты первого типа долж-

ны встречаться чаще. Рассмотренные выше примеры лент/полос на рис. 3, 4, а также полосы на рис. 1, а, в тоже относятся к первому типу, но если бы лента была зеркально-симметричной, а справа и слева от нее располагались ленты, связанные с исходной за счет действия кристаллографической плоскости g , то контакт внутри лент перестал бы являться порождающим и тип ленты сменился бы на второй.

Значение ИHD-структуры, строго говоря, зависит не от СК, а от занятых структурными единицами решеточных комплексов (см. [36]). Однако чаще всего у структур с совпадающими СК совпадает и набор занятых решеточных комплексов [9]. Значения ИHD для решеточных комплексов, занятых полимино в исследованных разбиениях, перечислены в табл. 2. СК центрированных групп имеют ИHD = 1, следовательно, любая лента/полоса из трансляционно связанных полимино, обнаруженная в структуре такого СК, относится к второму типу. Полный список двумерных СК с ИHD = 1 был приведен ранее [37].

Рентгеноструктурное исследование полиморфизма молекулярных кристаллов является сложной задачей. Во-первых, необходимо иметь реальный монокристалл в надежде, что его кристаллическая структура окажется новой (еще не исследованной) полиморфной модификацией для данного соединения. Во-вторых, оптимально, чтобы на начальном этапе эксперимента параметры приведенной элементарной ячейки решетки трансляций и/или пространственная группа симметрии очередного «претендента» на новую полиморфную модификацию отличались от таковых для уже исследованных кристаллических структур. Тогда можно продолжать рентгеноструктурное исследование монокристалла, после завершения которого в Кембриджском банке

Таблица 2

Имплицитная иерархическая сложность (ИHD) структурных классов (СК) решетчатых разбиений плоскости на додекамино

СК	Решеточный комплекс	ИHD
$p1$; $Z = 1(1)$	$p2 a$	2
$p2$; $Z = 1(2)$		
pm ; $Z = 1(m)$	$p2mm a$	2
$p2mm$; $Z = 1(2mm)$		
cm ; $Z = 2(m)$	$c2mm a$	1
$c2mm$; $Z = 2(2mm)$		

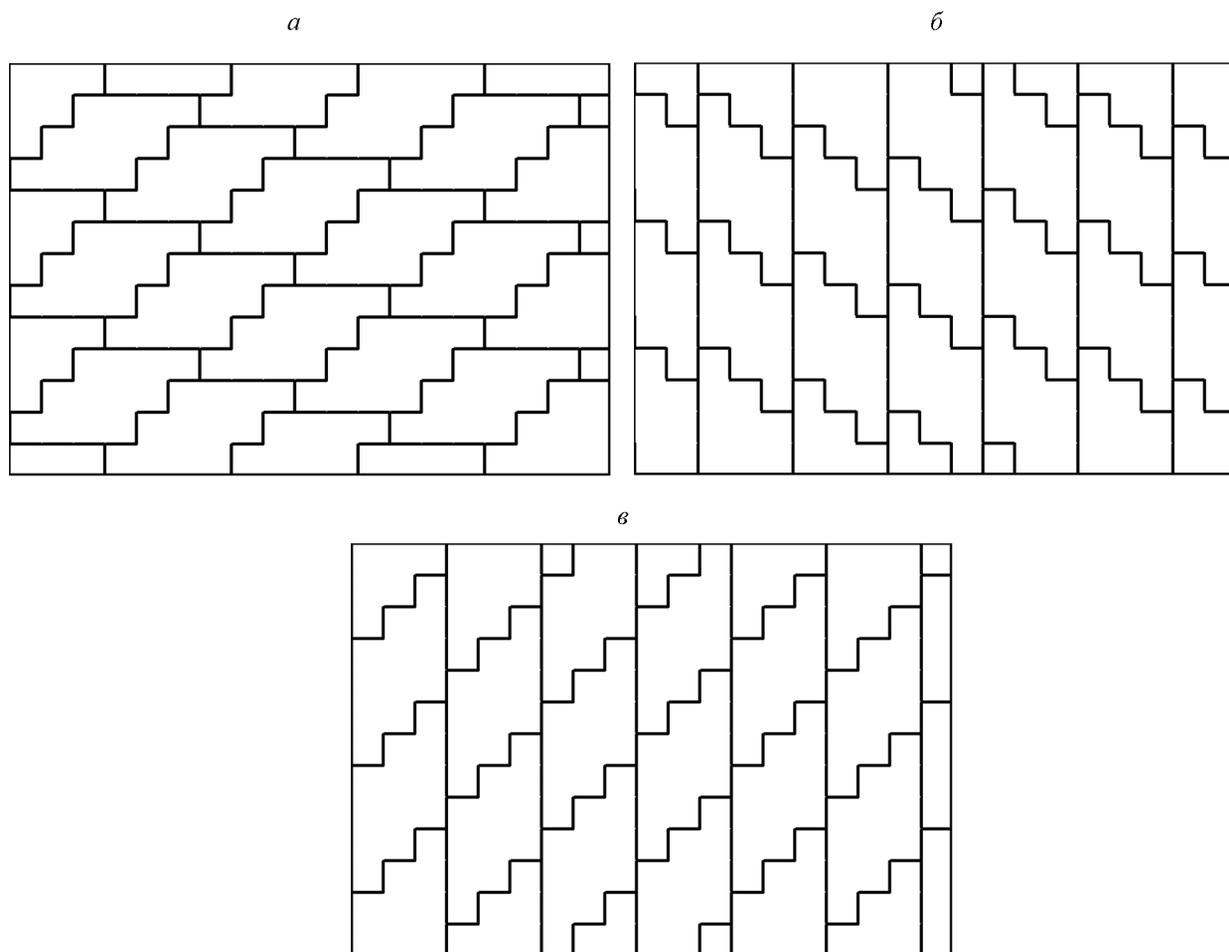


Рис. 6. Фрагменты трио разбиений-близнецов № 1235 (а), № 1499 (б) и № 1500 (в)

структурных данных (CSD) [38] появится новая полиморфная модификация изучаемого соединения. Но если и решетка трансляций, и пространственная группа симметрии кристалла совпадают с уже известными параметрами (размещенными в CSD), то рентгеноструктурный эксперимент, как правило, прекращают. В свою очередь, систематическое исследование разбиений плоскости на полимино позволяет выявлять еще не достаточно изученные особенности полиморфизма молекулярных кристаллов. Среди 3205 вариантов Браве-разбиений плоскости на додекамино 800 вариантов имеют полиморфные модификации. Эти полиморфные модификации обычно существуют либо в виде двух разбиений (дуэтов), либо в виде трех (трио) разбиений.

Рассмотрим Браве-разбиения, у которых $KЧ = 6$ и попарно одинаковые длины границ между базисным полимино и полимино его первой координационной сферы, но разные решетки трансляций. Более того, их плоские группы симметрии совпадают. К СК $p1; Z = 1(1)$ относятся 68

дуэтов такого вида Браве-разбиений, к СК $p2; Z = 1(2) - 36$ дуэтов и 4 трио. Такие Браве-разбиения плоскости являются ординарными полиморфами, их можно использовать при моделировании полиморфных модификаций реальных молекулярных слоев в уже исследованных кристаллических структурах, помещенных в CSD (решетки трансляций разные). Но существуют и решетчатые разбиения-близнецы. К СК $p1; Z = 1(1)$ относятся 15 дуэтов такого вида Браве-разбиений, к СК $p2; Z = 1(2) - 11$ дуэтов и 1 трио. В качестве примера рассмотрим решетчатые разбиения-близнецы № 1235, № 1499 и № 1500, фрагменты которых показаны на рис. 6. Поскольку они относятся к одному СК $p2; Z = 1(2)$, то имеют одинаковое значение $ИHD = 2$. Решетки трансляций этих разбиений и СК совпадают. Длины границ (5, 3, 1) тоже попарно совпадают. Тем не менее это разные Браве-разбиения плоскости на додекамино. Разбиения № 1235 и № 1499 отличаются друг от друга, во-первых, ориентацией полимино относительно базиса приведенной элементарной

ячейки решетки трансляций и, во-вторых, формой агломератов. Так как в этих разбиениях нет длинных границ между полимино, у которых $A > 2(B + C)$, то агломераты здесь, строго говоря, не сформированы. Поэтому ленты (1, 1) в разбиении № 1235 и полосы в разбиении № 1499, равно как и полосы на рис. 1, а, будем называть геометрическими агломератами. Существуют ли реальные молекулярные слои, столь сильно похожие друг на друга (близнецы), нам в данный момент не известно. В Браве-разбиениях № 1499 и № 1500 даже геометрические агломераты имеют одинаковую форму (полосы). Но теперь эти два разбиения-близнеца отличаются друг от друга энантимером полимино (левый и правый).

Выводы

1. Каждое из 3205 Браве-разбиений плоскости на додекамино имеет решетку трансляций

(косоугольную, прямоугольную примитивную или прямоугольную центрированную) и плоскую группу симметрии ($p1$, $p2$, pm , $p2mm$, cm или $c2mm$). Для каждого Браве-разбиения плоскости на додекамино определен структурный класс (СК).

2. Подавляющее большинство (более 83%) Браве-разбиений плоскости на додекамино относится к СК $p1$; $Z = 1(1)$, и только 9 вариантов (менее 0,3%) – к СК pm ; $Z = 1(m)$.

3. Существуют Браве-разбиения плоскости, в которых собственная точечная группа симметрии додекамино (m или $2mm$) реализуется полностью как кристаллографическая только на уровне подструктур Браве-разбиения.

4. Существуют «механически прочные» одномерные агломераты (полосы и ленты), в которых додекамино связаны между собой «механическими замками».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Semenov M.Y., Kraposhin V.S., Talis A.L., Simich-Lafitskii N.D. // Met. Sci. Heat Treat. 2020. Vol. 62. P. 109.
2. Maleev A. V // Cryst. Rep. 2001. Vol. 46. P. 154.
3. Maleev A. V // Cryst. Rep. 2013. Vol. 58. P. 760.
4. Maleev A.V. // Cryst. Rep. 2002. Vol. 47. P. 731.
5. Rau V.G., Zhuravlev V.G., Rau T.F., Maleev A. V // Crystallogr. Reports. 2002. Vol. 47. P. 727.
6. Nespolo M. // J. Appl. Crystallogr. 2019. Vol. 52. P. 451.
7. Zorkii P.M., Bel'skii V.K., Lazareva S.G., Porai-Koshits M.A. // J. Struct. Chem. 1967. Vol. 8. P. 267.
8. Belsky V.K., Zorky P.M. // Acta Cryst. 1977. Vol. A33. P. 1004.
9. Belsky V.K., Zorkaya O.N., Zorky P.M. // Acta Crystallogr. Sect. A. 1995. Vol. 51. P. 473.
10. Zorkii P.M., Oleinikov P.N. // J. Struct. Chem. 2001. Vol. 42. P. 24.
11. Desiraju G.R. // Angew. Chemie Int. Ed. English. John Wiley & Sons, Ltd, 1995. Vol. 34. P. 2311.
12. Dunitz J.D., Gavezzotti A. // Cryst. Growth Des. 2012. Vol. 12. P. 5873.
13. Zefirov Y. V, Zorky P.M. // Russ. Chem. Rev. 1995. Vol. 64. P. 415.
14. Blatov V.A. // Crystallogr. Rev. 2004. Vol. 10. P. 249.
15. Spackman M.A., Jayatilaka D. // CrystEngComm. 2009. Vol. 11. P. 19.
16. Zorky P.M. // J. Mol. Struct. 1996. Vol. 374. P. 9–28.
17. Zorkii P.M., Zorkaya O.N. // J. Struct. Chem. 1998. Vol. 39. P. 103.
18. Zorkii P.M., Obodovskaya A.E., Panina N.G. // Crystallogr. Reports. 2003. Vol. 48. P. 351.
19. Banaru A.M., Zorkii P.M., Obodovskaya A.E. // Crystallogr. Reports. 2007. Vol. 52. P. 634.
20. Maleev A. V, Sedov B.B., Zhitkov I.K., Rau V.G. // J. Struct. Chem. 2007. Vol. 48. P. 150.
21. Maleev A. V, Gevorgyan A.A., Potekhin K.A. // J. Struct. Chem. 2018. Vol. 59. P. 455.
22. Ismieiev A.I., Potekhin K.A., Maleev A.V, Maharramov A.M. // J. Struct. Chem. 2019. Vol. 60. P. 1896.
23. Banaru A.M. // Moscow Univ. Chem. Bull. 2019. Vol. 74. P. 101.
24. Seravkin K.G., Potekhin K.A., Banaru A.M. // Moscow Univ. Chem. Bull. 2024. Vol. 79. P. 14.
25. Delgado Friedrichs O., Dress A.W.M., Huson D.H., Klinowski J., Mackay A.L. // Nature. 1999. Vol. 400. P. 644.
26. Pidcock E., Motherwell W.D.S., Cole J.C. // Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. 2003. Vol. 59. P. 634.
27. Delgado-Friedrichs O., O'Keefe M., Yaghi O.M. // Acta Crystallogr. Sect. A. 2006. Vol. 62. P. 350.
28. Delgado-Friedrichs O., O'Keefe M. // Acta Crystallogr. Sect. A. 2007. Vol. 63. P. 344.
29. Li M., O'Keefe M., Proserpio D.M., Zhang H.-F. // Cryst. Growth Des. American Chemical Society, 2020. Vol. 20. P. 4062.
30. Mena-Hernando S., Pérez E.M. // Chem. Soc. Rev. The Royal Society of Chemistry, 2019. Vol. 48. P. 5016.
31. Banaru A.M., Banaru D.A., Aksenov S.M. // J. Struct. Chem. 2023. Vol. 64. P. 631.
32. Banaru D.A., Aksenov S.M., Banaru A.M., Oganov A.R. // Z. Krist. 2024. Vol. 239. P. 207.
33. Banaru A.M., Banaru D.A., Aksenov S.M. // Cryst. Rep. 2022. Vol. 67. P. 1133.
34. Worsham J.E., Levy H.A., Peterson S.W. // Acta Crystallogr. 1957. Vol. 10. P. 319.
35. Pauling L. // J. Am. Chem. Soc. American Chemical Society, 1929. Vol. 51. P. 1010.

36. Koch E., Fischer W. // *Acta Crystallogr. Sect. A.* 1985. Vol. 41. P. 421.
37. Banaru D.A., Aksenov S.M., Banaru A.M., Potekhin K.A. // *Cryst. Rep.* 2023. Vol. 68. P. 546.
38. Groom C.R., Bruno I.J., Lightfoot M.P., Ward S.C. // *Acta Cryst. Sect. B.* 2016/04/01. International Union of Crystallography, 2016. Vol. 72. P. 171.

Информация об авторах

Константин Григорьевич Серавкин – аспирант кафедры ФМОиИТ Владимирского государственного университета (seravkin@rambler.ru);

Константин Альбертович Потехин – профессор кафедры ФМОиИТ Владимирского государственного университета, докт. физ.-матем. наук (konstantin-potekhin@yandex.ru);

Александр Михайлович Банару – доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ, сотр. Федерального исследовательского центра «Кольский научный центр» РАН, Апатиты, Россия, канд. хим. наук (banaru@phys.chem.msu.ru).

Вклад авторов

Все расчеты решетчатых разбиений плоскости на полимино выполнены К.Г. Серавкиным. Составление черновика рукописи выполнено К.А. Потехиным. Обсуждение результатов выполнено всеми авторами.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Соблюдение этических стандартов

В данной работе отсутствуют исследования человека и животных.

Статья поступила в редакцию 28.05.2024;
одобрена после рецензирования 16.06.2024;
принята к публикации 25.11.2024.