ЖУРНАЛ СТРУКТУРНОЙ ХИМИИ

2014. Том 55 *Приложение № 1* *S111 – S125*

ОБЗОРЫ

УДК 548.12

К 160-летию со дня рождения академика Е.С. Фёдорова
и 120-летию его статьи
"Основания морфологии и систематики многогранников"

АЛГОРИТМ Е.С. ФЁДОРОВА ГЕНЕРИРОВАНИЯ КОМБИНАТОРНОГО МНОГООБРАЗИЯ ВЫПУКЛЫХ ПОЛИЭДРОВ: ПОСЛЕДНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ПРИЛОЖЕНИЯ

Ю.Л. Войтеховский

Геологический институт Кольского НЦ РАН, Апатиты
E-mail: woyt@geoksc.apatity.ru

Статья поступила 29 января 2014 г.

В статье рассмотрен алгоритм Е.С. Фёдорова, позволяющий получить из тетраэдра полное комбинаторное разнообразие выпуклых полиэдров. Приведены последние результаты о числе комбинаторно различных выпуклых n-эдров для данного n и их точечных группах симметрии. Показаны возможные применения результатов. Сформулированы задачи, которые сегодня можно решить лишь с применением мощных компьютеров.

Ключевые слова: выпуклый полиэдр, комбинаторный тип, фёдоровский алгоритм, точечная группа симметрии, кристаллографические и некристаллографические группы симметрии, комбинаторно асимметричные полиэдры, проекция Шлегеля, систематика и номенклатура выпуклых полиэдров.

ВВЕДЕНИЕ

Труды Е.С. Фёдорова составляют платформу современной кристаллографии. Казалось бы, они досконально изучены. Но в том и проявляется гениальность ученого, что через многие годы обнаруживается фундаментальный характер и нерастраченный ресурс его работ, пребывавших до того на обочине главных творческих идей. Такова статья "Основания морфологии и систематики многогранников". Достаточно сказать, что она не числится среди его основных работ [26] и не рассмотрена в фундаментальной монографии И.И. Шафрановского по истории кристаллографии [31]. Правда, сам Е.С. Фёдоров писал в предисловии к статье: "Эта работа составляет еще одну из ряда тех, в которых подвергнуты более подробному исследованию вопросы, намеченные в "Началах учения о фигурах". Если я решаюсь теперь же предать ее опубликованию, то делаю это не потому, чтобы она представляла в моих глазах особое значение по своим приложениям; я делаю это потому, что недавнее появление книги известного немецкого математика Эбергардта "Zur Morphologie der Polyeder" может вызвать у многих лиц интерес к предмету и ряд новых исследований в этом направлении" [25, с. 241]. А в письме к П. Гроту от 6 декабря 1895 г. находим следующее замечание: "Работа о морфологии и систематике полиэдров ... имеет весьма ограниченный интерес для минералогов и кристаллографов, ибо она преследует чисто геометрические цели" [32, с. 68].

Но, анализируя аргументы против формально-алгебраической систематики полиэдров по Эбергардту, в один класс которой попадают формы с числами разноименных граней, удовлетворяющими одному и тому же диофантову уравнению, убеждаемся, что и здесь Е.С. Фёдоров вовсе не изменяет кристаллографическим пристрастиям. Именно поэтому он не согласен с тем, что в разные классы попадают такие кристаллографически родственные полиэдры, как куб и октаэдр и, наоборот, в один класс попадают формы, никогда не образующие огранку одного и того же минерала [1]. Е.С. Фёдоров предложил не принцип систематики, а нечто большее — алгоритм генерирования полного комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров из тетраэдра, обеспечивающий их генеалогическую систематику и сохранение кристаллографического родства. Сочетание кристаллографических и геометрических мотивов в алгоритме органично. Ведь притупления ребер новыми гранями, например, в соответствии с законом компликации В. Гольдшмидта — это классическая тема минералогической кристаллографии. С другой стороны, операций притупления в алгоритме ровно три, и они обеспечивают появление на полиэдре необходимых 3-, 4- и 5-угольных граней в силу известной геометрической теоремы.

В статье ″Основания морфологии и систематики многогранников″ Е.С. Фёдоров вышел за пределы кристаллографии в область комбинаторной геометрии выпуклых полиэдров, предложив корректный способ их рекуррентного перечисления. По сути, комбинаторная геометрия выпуклых полиэдров превращена им в ″оболочку″ минералогической кристаллографии со многими смысловыми связями между ними. Ни до, ни после Е.С. Фёдорова никто не охватывал единым рассмотрением два мира — кристаллических и абстрактных полиэдров. Уже на выведенных им 4- … 7- и простых 8- и 9-эдрах он заметил тенденцию к преобладанию комбинаторно асимметричных форм, что противоречило интуиции минералога. Рискну предположить, что этим и были стимулированы работы по изучению геометрии кристаллического пространства. Перечисление комбинаторных типов выпуклых полиэдров стало впоследствии важной математической задачей с приложениями в различных областях естествознания. Фёдоровский алгоритм оказался замечательно приспособленным для компьютеризации. Именно благодаря ему удалось получить наиболее полные результаты, возвратившие — впервые после Е.С. Фёдорова — приоритет российской науке в этой области.

ИСТОРИЯ ПРОБЛЕМЫ И ПОСЛЕДНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Не следует думать, что перечисление комбинаторных типов выпуклых полиэдров началось с Е.С. Фёдорова, а начавшись, следовало лишь его алгоритму. История интернационального исследования проблемы выглядит следующим образом. Систематическое перечисление комбинаторных типов полиэдров начал T.P. Kirkman [50], описавший (без рисунков) все 4- ... 8-эдры и двойственные им 4- ... 8-акры (вершинники). Затем Е.С. Фёдоров [25] с помощью своего алгоритма нашёл и изобразил все 4- ... 7-, а также простые 8- и 9-эдры. Работа [50] ему не была известна. Это ясно из того, что число 7-эдров у них различно и Е.С. Фёдоров это обстоятельство не обсуждает. O. Hermes [49], также независимо, нарисовал все 4- ... 8-эдры, M. Brückner [38] — простые 4- … 10-эдры, C.J. Bouwkamp [35] — полиэдры с числом ребер до 14. Этим завершился период рисования. Прошло немало лет, прежде чем вооруженные компьютерами математики вернулись к проблеме. D.W. Grace [48] пересчитал все простые 4- ... 11-эдры, R. Bowen и S. Fisk [36] — все 4- … 12-вершинные триангуляции на сфере и тем самым — двойственные им простые 4- ... 12-эдры. D. Britton и J.D. Dunitz [37] изобразили все 4- ... 8-акры, P.J. Federico — дуальные им 4- … 8- и все 9-эдры [45, 46]. Число всех 10-эдров впервые нашли A.J.W. Duijvestijn и P.J. Federico [41], ими же дана статистика полиэдров с различными порядками групп автоморфизмов. P. Engel с помощью компьютерного варианта фёдоровского алгоритма нашёл все 11-, 12-, простые 13-эдры [42, 43] и дал наиболее полную статистику простых 4- … 15-эдров по порядкам групп автоморфизмов [44]. Авторы работ [2, 3, 20, 52, 53, 60-62, 64, 67, 69] проверили данные о комбинаторных типах и точечных группах симметрии всех 4- ... 12-, а также простых 13- ... 16-эдров, устранили ошибки и опубликовали изображения всех 4- ... 8- и простых 9- ... 12-эдров. Точечные группы симметрии простых 13- … 16-эдров найдены впервые. Они характеризуют полиэдры детальнее, чем порядки групп автоморфизмов. Кроме того, точечные группы симметрии прямо приспособлены к использованию результатов в области кристаллографии. Самые полные статистики выпуклых полиэдров с различными числами граней и вершин, а также их точечных групп симметрии даны в табл. 1 и 2.

Таблица 1

Числа комбинаторно различных полиэдров с F гранями и V вершинами

F \ *V*	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
4	1												
5		1	1										
6		1	2	2	2								
7			2	8	11	8	5						
8			2	11	42	74	76	38	14				
9				8	74	296	633	768	558	219	50		
10				5	76	633	2635	6134	8822	7916	4442	1404	233
11					38	768	6134	25626	64439	104213	112082	79773	36528
12					14	558	8822	64439	268394	709302	1263032	1556952	1338853

F \ *V*	17	18	19	20	22	24	26	28
11	9714	1249						
12	789749	306470	70454	7595				
13					49566			
14						339722		
15							2406841	
16								17490241

Таблица 2

Статистика точечных групп (ТГС) симметрии выпуклых 4- … 16-*эдров*

п.г.а.	ТГС	*F*	4	5		6				7					8							9							
		V	4	5	6	5	6	7	8	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10	11	12	7	8	9	10	11	12	13	14
1	1										2	3	2			3	22	48	44	21	2	2	48	237	533	662	449	164	16
2	2						1				1	2		1		2	5	5	8	1	1		5	8	22	10	25	3	7
	m							1		1	2	4	4			4	11	17	19	12	4	4	17	48	71	87	74	46	18
	–1																												
3	3																									1			
4	222																												
	*mm*2							1	1	1		2	2	1	1	2		1	2	4	3	2	1		7	5	10	4	5
	4																												
	2/*m*																		1										
	–4																												
6	32																												
	–6																												
	3*m*										2			2				2					2			2			1
8	4*mm*			1																				2				2	
	mmm																1												
	–4 2*m*																2		1		1								
10	5*m*						1																						
12	–6*m*2				1	1												1					1			1			2
	–3*m*																				1								
	6*mm*										1																		

Продолжение табл. 2

п.г.а.	ТГС	F	4	5		6				7					8							9							
		V	4	5	6	5	6	7	8	6	7	8	9	10	6	7	8	9	10	11	12	7	8	9	10	11	12	13	14
	23																												
14	7*m*																1												
	4/*mmm*																												
16	–8 2*m*																		1										
	8*mm*																							1					
18	9*m*																												
	–10*m*2													1															
20	–5*m*																												
	10*mm*																												
22	11*m*																												
	6/*mmm*																				1								
24	–43*m*		1																		1								
	–12 2 *m*																												
28	–7*m*																												
	–14*m*2																												1
32	8/*mmm*																												
36	–18*m*2																												
40	10/*mmm*																												
44	–22*m*2																												
48	*m*3*m*								1						1														
	12/*mmm*																												
52	–26*m*2																												
56	14/*mmm*																												
120	–3—5*m*																												
	Σ		1	1	1	1	2	2	2	2	8	11	8	5	2	11	42	74	76	38	14	8	74	296	633	768	558	219	50

п.г.а.	ТГС	F	10									
		V	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1			44	533	2401	5790	8331	7491	4052	1235	137
	2		1	8	22	56	58	109	55	87	13	18
2	*m*			19	71	145	273	347	341	275	143	51
	–1					1		3		3		
3	3					3			4			1
	222					1		3		1		
	*mm*2		1	2	7	14	13	17	11	19	13	11
4	4											
	2/*m*			1		4		6		4		2
	–4							1				
	32											
6	–6											
	3*m*		2			9			14			6
	4*mm*							2				1
8	*mmm*									1		2
	–4 2*m*			1				1				1
10	5*m*											

П р о д о л ж е н и е т а б л. 2

п.г.а.	ТГС	*F*	10									
		V	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
12	–6*m*2											
	–3*m*											
	6*mm*											
	23											
14	7*m*											
16	4/*mmm*							1				
	–8 2*m*			1								1
	8*mm*											
18	9*m*					1						
20	–10*m*2		1									
	–5*m*							1				
	10*mm*											
22	11*m*											
24	6/*mmm*											
	–43*m*											1
	–12 2 *m*											
28	–7*m*											
	–14*m*2											
32	8/*mmm*											1
36	–18*m*2											
40	10/*mmm*											
44	–22*m*2											
48	*m*3*m*											
	12/*mmm*											
52	–26*m*2											
56	14/*mmm*											
120	–3—5*m*											
Σ			5	76	633	2635	6134	8822	7916	4442	1404	233

п.г.а.	ТГС	*F*	11										
		V	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1		21	662	5790	24888	63080	102524	110015	78169	35199	9176	970
	2		1	10	58	72	241	143	375	110	253	24	54
2	*m*		12	87	273	646	1076	1520	1648	1449	1034	492	187
	–1												
3	3			1			4			5			1
	222												
	*mm*2		4	5	13	17	25	26	44	25	40	22	27
4	4												
	2/*m*												
	–4												
	32						1						
6	–6												
	3*m*			2			9			13			5

П р о д о л ж е н и е   т а б л.   2

п.г.а.	ТГС	F	11										
		V	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	4*mm*												
8	*mmm*												
	–4 2*m*												
10	5*m*					2					2		
	–6*m*2			1			3			2			4
12	–3*m*												
	6*mm*												
	23												
14	7*m*												
	4/*mmm*												
16	–8 2*m*												
	8*mm*												
18	9*m*												
	–10*m*2												
20	–5*m*												
	10*mm*					1							
22	11*m*												
	6/*mmm*												
24	–43*m*												
	–12 2 *m*												
28	–7*m*												
	–14*m*2												
32	8/*mmm*												
36	–18*m*2												1
40	10/*mmm*												
44	–22*m*2												
48	*m*3*m*												
	12/*mmm*												
52	–26*m*2												
56	14/*mmm*												
120	–3—5*m*												
	Σ		38	768	6134	25626	64439	104213	112082	79773	36528	9714	1249

п.г.а.	ТГС	F	12												
		V	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	1		2	449	8331	63080	265253	704267	1255238	1548735	1329899	783543	301763	68697	6756
	2		1	25	109	241	635	695	1458	899	1577	545	846	113	146
2	*m*		4	74	347	1076	2393	4282	6109	7242	7129	5580	3708	1598	597
	–1				3		24		64		68		38		4
3	3					4			14			10			1
	222				3		10		10		16		5		3
	*mm*2		3	10	17	25	49	58	86	73	112	53	84	46	53
4	4								1						
	2/*m*				6		18		23		35		18		10
	–4				1		5		3		8		1		2

Продолжение табл. 2

п.г.а.	ТГС	*F*	12												
		V	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	32					1						2			1
6	–6											1			1
	3*m*					9			12			14			5
	4*mm*				2				2				1		
8	*mmm*						2		1		3		2		4
	–4 2*m*		1		1		4		2		6		2		6
10	5*m*									2					1
	–6*m*2					3			3			1			1
12	–3*m*		1						4						2
	6*mm*														
	23														
14	7*m*														
	4/*mmm*				1								2		
16	–8 2*m*														
	8*mm*														
18	9*m*														
	–10*m*2									1					
20	–5*m*				1										
	10*mm*														
22	11*m*						1								
	6/*mmm*		1												
24	–43*m*		1												
	12 2 *m*								1						
28	–7*m*														
	–14*m*2														
32	8/*mmm*														
36	–18*m*2														
40	10/*mmm*														1
44	–22*m*2														
48	*m*3*m*								1						
	12/*mmm*														
52	–26*m*2														
56	14/*mmm*														
120	–3–5*m*														1
	Σ		14	558	8822	64439	268394	709302	1263032	1556952	1338853	789749	306470	70454	7595

п.г.а.	ТГС	*F*	13	14	15	16	п.г.а.	ТГС	*F*	13	14	15	16
		V	22	24	26	28			*V*	22	24	26	28
1	1		47030	331796	2382352	17411448	16	4/*mmm*			2		
	2		425	1237	3315	9939		–8 2*m*					
2	*m*		1952	6300	20679	67035		8*mm*					
	–1			50		441	18	9*m*					
3	3		12	12	20	111	20	–10*m*2					

Окончание табл. 2

п.г.а.	ТГС	F	13	14	15	16	п.г.а.	ТГС	F	13	14	15	16
		V	22	24	26	28			V	22	24	26	28
	222			12		46		–5*m*					
	*mm*2		118	211	439	871		10*mm*					
4	4			1			22	11*m*					
	2/*m*			39		165	24	6/*mmm*					
	–4			3		20		–43*m*					2
	32			1	2			12 2 *m*			1		
6	–6			2	1		28	–7*m*					1
	3*m*		28	24	22	114		–14*m*2					
	4*mm*			5			32	8/*mmm*					
8	*mmm*			9		24	36	–18*m*2					
	–4 2*m*			5		21	40	10/*mmm*					
10	5*m*						44	–22*m*2		1			
	–6*m*2			4	10		48	*m*3*m*			2		
12	–3*m*			4				12/*mmm*			1		
	6*mm*			1			52	–26*m*2				1	
	23					1	56	14/*mmm*					1
14	7*m*					1	120	–3–5*m*					
								Σ		49566	339722	2406841	17490241

ФЁДОРОВСКИЙ АЛГОРИТМ

Напомним суть фёдоровского алгоритма. Несмотря на достигнутые с его помощью рекорды, в нем еще есть "тонкие" места, возможна оптимизация и нужны алгоритмические решения, сокращающие компьютерное время (например, проблема распознавания изоморфных полиэдрических графов и определения комбинаторной симметрии полиэдра по его описанию в форме развёртки или матрицы инциденций и т.д.).

Пусть f_i — число i-угольных граней; f, e и v — общее число граней, ребер и вершин любого выпуклого полиэдра, тогда:

$$f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + \ldots = f, \tag{1}$$

$$3f_3 + 4f_4 + 5f_5 + 6f_6 + \ldots = 2e. \tag{2}$$

Умножаем (1) на 6 и вычитаем (2):

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 = (6f - 2e) + f_7 + 2f_8 + 3f_9 + \ldots . \tag{3}$$

Для любого выпуклого полиэдра выполнено соотношение Эйлера

$$f - e + v = 2 \tag{4}$$

и нестрогое неравенство

$$2e - 3v \geq 0, \tag{5}$$

в котором равенство достигается для простых полиэдров. Умножаем (4) на 6 и прибавляем удвоенное (5):

$$6f - 2e \geq 12. \tag{6}$$

Подставляем (6) в (3):

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 \geq 12 + f_7 + 2f_8 + 3f_9 + \ldots . \tag{7}$$

Для простых полиэдров (7) преобразуется в диофантово уравнение:

$$3f_3 + 2f_4 + f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + 3f_9 + \ldots , \tag{8}$$

решения которого служат Эбергардту основным классификационным признаком соответствующих форм.

Из (7) следует невозможность выпуклого полиэдра без 3-, 4- и 5-угольных граней одновременно. Для их генерирования как раз и служат операции α, β и γ фёдоровского алгоритма. Операция α позволяет получить новую 3-угольную грань отсечением простой (в которой сходятся ровно 3 ребра) вершины полиэдра. Операция β позволяет получить новую 4-угольную грань отсечением ребра, соединяющего две простые вершины. Операция γ позволяет получить новую 5-угольную грань отсечением трех смежных простых вершин. Таким образом, три операции отсечения генерируют из простых n-эдров ($n \geq 4$) простые же ($n + 1$)-эдры. Операция ω редукции (стягивания) ребра может применяться последовательно несколько раз, порождая непростые полиэдры все более высоких порядков с сохранением числа граней.

Из сказанного видно, что фёдоровский алгоритм не свободен от недостатков. Первый состоит в его рекуррентном характере. Ошибка в перечислении простых n-эдров может транслироваться в многообразие простых ($n + 1$)-эдров. Аналогично, ошибка в перечислении непростых ($n + 1$)-эдров может транслироваться в многообразие непростых ($n + 1$)-эдров следующих порядков. Второй недостаток — большое число повторяющихся форм. Уже операции α и β, примененные к тетраэдру, порождают полиэдр с комбинаторикой 3-гранной призмы. Сравнение и отбраковка повторяющихся форм — хорошо известная проблема изоморфизма графов. Е.С. Фёдоров оценил ее следующим образом. "Из изложенного видно, в какой мере усложняется разрешение вопроса всякий раз при переходе от низшего порядка к следующему. Дальнейшие упрощения становятся существенно необходимыми для развития этой области знаний" [25, с. 329]. Именно в этом пункте автором предложена существенная оптимизация алгоритма.

Е.С. Фёдоровым рекомендовано следующее рациональное применение алгоритма. Операция α как самая простая применяется для получения простых полиэдров, содержащих хотя бы одну 3-угольную грань. Операция β применяется для получения простых полиэдров, не содержащих ни одной 3-угольной, но содержащих хотя бы одну 4-угольную грань. Наконец, операция γ применяется для получения простых полиэдров, не содержащих 3- и 4-угольных, но содержащих хотя бы одну 5-угольную грань. Но для последних из (8) следует

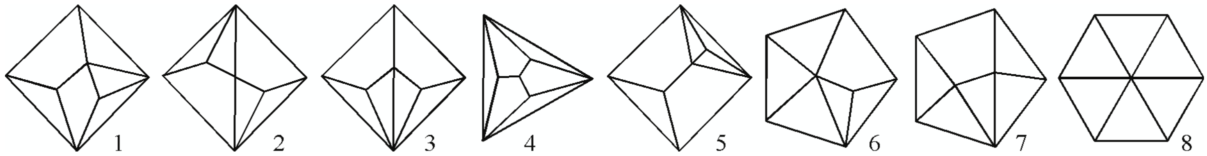
$$f_5 = 12 + f_7 + 2f_8 + 3f_9 + \ldots, \tag{9}$$

а (1) принимает вид:

$$f = 12 + f_6 + 2f_7 + 3f_8 + 4f_9 + \ldots. \tag{10}$$

Неотрицательные решения диофантова уравнения (10) возможны лишь при $f \geq 12$. Минимум $f = 12$ достигается при $f_6 = f_7 = f_8 = \ldots = 0$. Тогда из (9) следует $f_5 = 12$, т.е. все грани — 5-угольные. Это хорошо известный додекаэдр. Таким образом, "хотя бы одна 5-угольная грань" означает — не менее 12 таких граней. Для Е.С. Фёдорова, нашедшего "вручную" все 4- … 7-эдры, простые 8- и 9-эдры и так называемые парногранники вплоть до 12-эдров, перспектива систематического вывода хотя бы всех простых 12-эдров в силу их огромного числа осталась неразрешимой, а додекаэдр — единственным полиэдром, для вывода которого использована операция γ. Отсюда последовала идея автора — независимым перечислением простых полиэдров без 3- и 4-угольных граней, для получения которых как раз и нужна операция γ, отложить ее применение в фёдоровском алгоритме как можно далее.

Задача решается в несколько шагов. 1. Решение в неотрицательных числах f_i ($i > 4$) диофантова уравнения (9). Каждое решение записывается в виде гранного символа $[f_5 f_6 \ldots f_i]$. Но известно, что выпуклый полиэдр существует не для всякого символа. 2. Перечисление для каждого символа $[f_5 f_6 \ldots f_i]$ всех неповторяющихся кортежей из f граней, среди которых f_5 5-угольных, f_6 6-угольных, … f_i i-угольных. 3. Построение проекции Шлегеля полиэдра для каждого кортежа, если полиэдр возможен. Процедура прекращается, если: (а) полиэдр построен в соответствии с кортежем; (б) полиэдр построен до исчерпания кортежа; (в) полиэдр не построен, но кортеж исчерпан; (г) на некотором шаге требуемая грань отсутствует в кортеже. 4. Сравнение полиэдров, отвечающих данному кортежу, и устранение повторов. 5. Определение точечной группы симметрии полиэдра. 6. Получение изображения полиэдра данного комбинаторного типа.



F = 7 V = 7; группы симметрии: *1* 2, *2* 1, *m* 2, *3m* 2, *6mm* 1; **гранные символы: 43** 5, **511** 2, **6001** 1; **список: 43** *1*:1, *2*:2, *m*:3, *3m*:4,5, **511** *1*:6, *m*:7, **6001** *6mm*:8

Все 67 простых 12- … 20-эдров без 3- и 4-угольных граней найдены "вручную" и опубликованы в [4]. В [19] охарактеризованы все 12- … 25-эдры этого класса, найденные с помощью компьютерных программ, и опубликованы проекции Шлегеля самых симметричных представителей. Для f = 12 … 25 перечислены все гранные символы, достоверно реализуемые в виде выпуклых простых f-эдров, а также их число для каждого символа. Систематическое перечисление простых 25-эдров находится за обозримым горизонтом. Тем самым операция γ надолго исключена из фёдоровского алгоритма. Алгоритмы перечисления комбинаторных типов полиэдров с заданным гранным символом, сравнения повторяющихся форм, определения точечной группы симметрии, построения проекций Шлегеля и 3D изображений подробно приведены в монографии [24].

СИСТЕМАТИКА И НОМЕНКЛАТУРА

Поскольку проблема перечисления комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров активно исследуется, необходима их рациональная систематика и номенклатура. В течение многих лет автором выработаны следующие подходы.

Для представления выпуклого полиэдра сегодня нет лучшего способа, чем изображение. Наиболее удобны проекции Шлегеля на одну из граней полиэдра, максимально сохраняющие его симметрию. Но чтобы ими было удобно пользоваться, нужна систематизация форм. Известные способы их строгого упорядочения формальны, поэтому предлагается способ, наиболее понятный потенциальным потребителям — минералогам, кристаллографам и химикам. Многообразие полиэдров предлагается делить на классы по возрастанию числа граней, в пределах класса — по возрастанию числа вершин, далее — лексикографически упорядочивать по возрастанию гранного символа, в пределах символа — по возрастанию симметрии. К сожалению, и после столь дробной систематизации в некоторых группах остается немалое число форм.

Под гранным символом понимается последовательность цифр, указывающая число 3-, 4- … n-угольных граней на полиэдре. Чтобы избежать запятых, вместо двузначных чисел 10, 11, 12 … используются буквы латинского алфавита A, B, C … . Так, гранный символ **6001** означает, что на 7-эдре есть шесть 3- и один 6-, но нет 4- и 5-угольных граней; **0A01** — на 11-эдре есть десять 4- и один 6-, но нет 3- и 5-угольных граней, и т.д. Симметрия везде понимается в комбинаторном смысле, т.е. каждой форме приписана точечная группа симметрии наиболее симметричного представителя данного комбинаторного типа. Рассмотрим описание класса на следующем примере.

Описание означает, что класс 7-эдров (**F** = **7**) с семью вершинами (**V** = **7**) содержит 8 форм. Это устанавливается по номерам в конце **списка** и рисунку. В строке **группы симметрии** указаны числа полиэдров с различными точечными группами симметрии (в порядке возрастания, курсив, далее — ТГС): ТГС *1* — 2 полиэдра, *2* — 1 полиэдр, *m* — 2 полиэдра, *3m* — 2 полиэдра, *6mm* — 1 полиэдр. В строке **гранные символы** даны числа полиэдров с различными гранными символами (жирный шрифт): **43** — 5 полиэдров, **511** — 2 полиэдра, **6001** — 1 полиэдр. В строке **список** приводится самое полное описание полиэдров, в том же порядке данных на рисунке. Символ **43** имеют полиэдры: ТГС *1* — № 1, *2* — № 2, *m* — № 3, *3m* — № 4, 5; символ **511** имеют: ТГС *1* — № 6, *m* — № 7; символ **6001** и ТГС *6mm* имеет полиэдр № 8. Именно в таком виде дано описание выпуклых 4- … 12-эдров и простых 13- … 16-эдров в наиболее полных на сегодня каталогах [17].

ПРИЛОЖЕНИЯ

Первое приложение результатов следует из текстов самого Е.С. Фёдорова. В письме к П. Гроту от 26 марта 1893 г. сказано следующее: «Через неделю я надеюсь отправить Вам свою новую небольшую работу "Проблема-минимум в учении о симметрии". В этой работе объясняется, почему получается так, что большинство естественных кристаллов симметричны, а не асимметричны, как этого можно было бы ожидать, исходя из теории вероятностей. Это следствие принципа наименьшего действия, который приводит к тому, что при образовании кристалла вступает в силу принцип минимальной поверхности. И вот в моей работе доказывается, что самые симметричные формы обладают также и минимальной поверхностью. Так что проявляющуюся в природе симметрию следует рассматривать как закономерное следствие экономии, выраженной в известном законе наименьшего действия строго математически» [32, с. 35]. Неясно, на каких теоретических данных базировался Е.С. Фёдоров, полагая априорную вероятность асимметричных кристаллических полиэдров более высокой, чем симметричных. Полученная им же статистика абстрактных 4- … 7-, а также простых 8- и 9-эдров говорит обратное: первые асимметричные формы встречаются среди 7-эдров (их доля составляет 7/34), а среди простых 8- и 9-эдров их доли равны 2/14 и 16/50. Среди всех 8-эдров доля асимметричных составляет 140/257 [50], т.е. уже превышает половину. Но, как было обосновано выше, Е.С. Фёдоров не знал этой работы. Как бы то ни было, представляется важным, что он соединял в сознании два многообразия — абстрактных и кристаллических полиэдров.

При этом он верно ощущал различие между абстрактными и кристаллическими полиэдрами, проявляющееся в статистике точечных групп симметрии и выявленное к настоящему времени на большом материале. Каковы же результаты? Все 4-, 5- и 6-эдры (1, 2 и 7 соответственно) комбинаторно симметричны. Из 7-эдров (34) комбинаторно асимметричны 7 (20,588 %), 8-эдров (257) — 140 (54,475 %), 9-эдров (2606) — 2111 (81,005 %), 10-эдров (32300) — 30014 (92,923 %), 11-эдров (440564) — 430494 (97,714 %), 12-эдров (6384634) — 6336013 (99,238 %), простых 13-эдров (49566) — 47030 (94,884 %), 14-эдров (339722) — 331796 (97,667 %), 15-эдров (2406841) — 2382352 (98,983 %) и 16-эдров (17490241) — 17411448 (99,550 %). Тенденция очевидна — с ростом числа граней доля комбинаторно асимметричных полиэдров монотонно растёт, асимптотически стремясь к 1. С ростом порядка группы автоморфизмов доля полиэдров стремительно падает. Насколько многообразие кристаллических полиэдров отвечает этой особенности евклидова пространства? Подобно тому, как отклонения минерального индивида от идеала (по составу, структуре и форме) говорят исследователю об индивидуальных условиях и механизмах роста, статистические характеристики многообразия кристаллических полиэдров в земной коре на фоне тех же характеристик многообразия абстрактных полиэдров должны обобщенно говорить о специфике кристаллического пространства.

По данным Н.П. Юшкина и др. [34, с. 186 – 187; 70], в литосфере Земли преобладают минералы точечных групп симметрии *2/m* (26,35 % от общего числа) и *mmm* (16,46 %). Для минералов больших глубин статистика смещается в пользу более высоких, в зоне гипергенеза — низких симметрий. Но она никогда не смещается в пользу точечной группы симметрии *1* столь сильно, чтобы она стала довлеющей. К тому же, для абстрактных полиэдров найдены комбинаторные точечные группы симметрии, характеризующие наиболее симметричных представителей каждого комбинаторного типа. Н.П. Юшкиным и др. для минералов подразумеваются точечные группы симметрии общих кристаллографических форм. При их комбинаторном рассмотрении точечные группы симметрии некоторых пришлось бы повысить, например: группу симметрии *–4* тетрагонального тетраэдра — до группы симметрии *–43m* кубического тетраэдра, группу симметрии *4/mmm* тетрагональной дипирамиды — до группы симметрии *m3m* октаэдра и т.д. То есть статистики точечных групп симметрии абстрактных и кристаллических полиэдров отличны еще более, чем следует из приведенных выше данных.

Полученный результат требует осмысления. Подчеркивает ли он специфику кристаллического пространства, тяготеющего к более высоким (не примитивным) точечным группам симметрии, проявляющимся и во внешней форме кристаллических полиэдров. Или, как предсказал А.П. Хомяков [27], в открытии минералов произойдет инверсия в пользу низкосимметричных видов, и кристаллосимметрийная статистика постепенно согласуется с симметрийной статистикой абстрактных полиэдров. То ли природа согласует обе статистики тем, что, в соответствии с принципом диссимметрии Кюри, обычно производит реальные кристаллические многогранники менее симметричными, чем допускает их кристаллическая структура. "Индивиды минерального царства … появляются только в более или менее угнетённых или искалеченных формах … которые большей частью не имеют никакого отношения к тем кристаллическим формам, над созданием которых природа все же, в сущности, трудилась в каждом индивиде…" (пер. авт.) [51, с. 4].

Второе приложение результатов следует не из полученных характеристик или изображений выпуклых 4- … 16-эдров, а из разработанных по ходу дела алгоритмов и компьютерных программ. Заметим, что при условии $f_3 = f_4 = f_7 = f_8 = \ldots = 0$ из уравнений (9) и (10) следует, что $f_5 = 12$ и $f = 12 + f_6$. То есть у простого полиэдра, на котором разрешены лишь 5- и 6-угольные грани, первых ровно 12 при отсутствии видимых ограничений на число вторых. Это активно изучаемый в настоящее время класс фуллеренов, удивительный по разнообразию форм и приложениям в различных областях естествознания. Между тем в многообразии простых 4- … 12-эдров (более 6,8 млн. форм), генерированных с помощью фёдоровского алгоритма, мы находим лишь один (первый в бесконечном ряду) фуллерен — додекаэдр. Уже это показывает избыточность алгоритма для перечисления комбинаторно различных фуллеренов. Упростив его для решения столь узкой задачи, авторы нашли и охарактеризовали все (5770) фуллерены диапазона C_{20}—C_{60}, все (1236) фуллерены диапазона C_{62}—C_{70} без триплетов контактирующих пентагонов и все (1265) фуллерены диапазона C_{72}—C_{100} с изолированными пентагонами. В диапазоне C_{20}—C_{100}, кроме заведомо стабильных форм C_{60} (-3—$5m$) и C_{70} ($-10m2$), выявлены 12 потенциально стабильных (высокосимметричных, без контактирующих пентагонов) фуллеренов, нахождение которых в природе весьма вероятно. Результаты систематически изложены в статьях и каталогах [5, 6, 9—12, 55—59, 63, 65, 68].

Третье приложение результатов относится к минералогии и также использует алгоритмы, разработанные при компьютеризации фёдоровского алгоритма. Речь идет о перечислении реальных кристаллографических простых форм. Под таковой подразумевается полиэдр, ограниченный хотя бы некоторыми из граней идеальной простой формы, находящимися в стандартной ориентации, но на произвольном расстоянии от начала координат. Моноэдр, пинакоид, диэдр, тригональная пирамида и призмы не порождают реальных кристаллографических простых форм. Для ромбических и тетрагональных тетраэдров и пирамид, кубического тетраэдра, куба и ромбоэдра определение тривиально. Теорема Минковского утверждает, что выпуклый полиэдр с точностью до подобия фиксируется ориентациями нормалей и отношениями площадей граней. В нашем определении ориентация граней простой формы определяет ориентации нормалей. Но отношения площадей граней не заданы, что и порождает немалое комбинаторное разнообразие полиэдров для большинства закрытых простых форм. В ряде работ [13—15, 17, 18, 54, 66] опубликованы и охарактеризованы точечными группами симметрии все реальные кристаллографические октаэдры, тетрагональные, ромбические и тригональные бипирамиды, тригональные и тетрагональные трапецоэдры, а также комбинации куба и октаэдра. Их исследование лежит в русле идей Е.С. Фёдорова, тяготевшего к систематическому перечислению изучаемых объектов и отмечавшего в курсе кристаллографии 1891 г. необходимость изучения форм, отклоняющихся от идеала. Их изобилие в природе зафиксировал V. Goldschmidt [47]. По-видимому, результаты найдут основное применение при расшифровке генезиса минеральных индивидов [7, 8, 16] в соответствии с принципом диссимметрии П. Кюри [21, 39, 40]. Это классическая и далеко не исчерпанная тема российской минералогии [22, 23, 28—30, 33].

Выше охарактеризованы лишь те приложения фёдоровского алгоритма и разработанных на его основе компьютерных программ, которые развиваются автором. Но опубликованные в каталогах [17] результаты могут широко использоваться в физике и химии для анализа всевозможных координационных полиэдров и ячеек. Наконец, выпуклые полиэдры суть 3-связные планарные графы. Столь фундаментальных свойства превращают их в математические модели, область применения которых выходит за всякие границы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Главное, что хотелось показать в этой статье — далеко не исчерпанный ресурс научного наследия Е.С. Фёдорова. Лучшим дополнением к сказанному будет небольшой список нерешенных проблем, связанных с его алгоритмом генерирования комбинаторного многообразия выпуклых полиэдров. С одной стороны, они должны стимулировать творчество будущих поколений исследователей. С другой стороны, представляется, что их решение возможно лишь при сочетании теоретических подходов и компьютерного перечисления определенных классов полиэдров.

1. Не решена главная задача комбинаторной теории выпуклых полиэдров — определить по гранному символу, возможна ли его реализация на выпуклом полиэдре, а если возможна — как перечислить комбинаторное многообразие выпуклых полиэдров с данным символом. Имеющиеся результаты уже подсказали формулировки ряда теорем, предъявляющих необходимые, но не достаточные требования к гранным символам выпуклых полиэдров (так, доказано, что на каждом выпуклом полиэдре должны присутствовать четверка, тройка и пара или три пары одноимённых граней).

2. На генерированных 4- … 12-эдрах и простых 13- … 16-эдрах установлены 44 точечные группы комбинаторной симметрии, среди которых 24 — кристаллографических (1, 2, *m*, –1, 3, 222, *mm*2, 4, 2/*m*, –4, 32, –6, 3*m*, 4*mm*, *mmm*, –42*m*, –6*m*2, –3*m*, 6*mm*, 23, 4/*mmm*, 6/*mmm*, –43*m*, *m*3*m*) и 20 — некристаллографических (5*m*, 7*m*, –82*m*, 8*mm*, 9*m*, –10*m*2, –5*m*, 10*mm*, 11*m*, –12*m*2, –7*m*, –14*m*2, 8/*mmm*, –18*m*2, 10/*mmm*, –22*m*2, 12/*mmm*, –26*m*2, 14/*mmm*, –3 – 5*m*). Нужны алгоритмы, позволяющие перечислять все простейшие (с минимальным числом вершин / граней / ребер) выпуклые полиэдры заданной комбинаторной симметрии, в первую очередь — отсутствующих кристаллографических точечных групп (–3, 4/*m*, 422, 6, 6/*m*, 622, *m*3, 432).

3. Довлеющее преобладание комбинаторно асимметричных выпуклых полиэдров с ростом числа граней должно быть подтверждено для последующих классов: общих 13- и простых 17-эдров. Перед нами стоит проблема — конструктивно (не через отрицание симметрии) определить категорию асимметрии и найти принципы классификации комбинаторно асимметричных выпуклых полиэдров.

Перефразировав Е.С. Фёдорова, завершу статью так: "Если я решаюсь предать ее опубликованию, то потому, что фёдоровский алгоритм представляет в моих глазах большое значение по теоретическим результатам и приложениям".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Богомолов С.А.* // Зап. РМО. – 1929. – Ч. 58. – С. 265 – 277.
2. *Войтеховский Ю.Л.* Грануломорфология: приводимые 4- … 8-эдры, простые 9- и 10-эдры. – Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 1999.
3. *Войтеховский Ю.Л.* Грануломорфология: простые 11-эдры. – Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2000.
4. *Войтеховский Ю.Л.* // Зап. ВМО. – 2001. – № 4. – С. 24 – 31.
5. *Войтеховский Ю.Л.* // Зап. ВМО. – 2002. – № 5. – С. 1 – 11.
6. *Войтеховский Ю.Л.* // Докл. АН. – 2003. – **393**, № 5. – С. 664 – 668.
7. *Войтеховский Ю.Л.* // Докл. АН. – 2005. – **400**, № 3. – С. 355 – 358.
8. *Войтеховский Ю.Л., Бубнова Т.П.* // Тр. Всерос. научн. школы "Математические исследования в кристаллографии, минералогии и петрографии". – Апатиты, 3—7 октября 2005 г. – Апатиты: Изд-во K & M, 2005. – С. 95 – 122.
9. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* Фуллерены C_{20}—C_{60}: каталог комбинаторных типов и точечных групп симметрии. – Апатиты: Изд-во K & M, 2002.
10. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* // Кристаллография. – 2002. – **47**, № 5. – С. 785 – 787.
11. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* // Зап. ВМО. – 2002. – № 2. – С. 30 – 37.
12. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* Фуллерены C_{62}—C_{100}: каталог комбинаторных типов и точечных групп симметрии. – Апатиты: Изд-во K & M, 2003.
13. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* Комбинаторная кристалломорфология. Кн. I. Реальные кристаллографические простые формы. – Апатиты: Изд-во K & M, 2004.
14. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* // Зап. ВМО. – 2004. – № 2. – С. 112 – 120.

15. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* Комбинаторная кристалломорфология. Кн. II. Реальные кристаллографические ромбододекаэдры. Полиэдрические формы в живой и косной природе. – Апатиты: Изд-во K & M, 2005. – С. 51 – 84.
16. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* // Зап. РМО. – 2005. – № 1. – С. 97 – 103.
17. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г.* Комбинаторная кристалломорфология. Кн. III. Комбинации куба и октаэдра. – Апатиты: Изд-во K & M, 2007.; Кн. IV. Выпуклые полиэдры. Т. I. 4- … 12-эдры. – Апатиты: Изд-во K & M, 2008.; Т. II. Простые 13- … 16-эдры. – Апатиты: Изд-во K & M, 2008.
18. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Макаров М.С.* // Зап. РМО. – 2006. – № 5. – С. 101 – 102.
19. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Сотникова Т.Д.* // Труды Лаборатории математических исследований в кристаллографии, минералогии и петрографии. 2000—2006. – Апатиты: Изд-во K & M, 2006.
20. *Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г., Ярыгин О.Н.* Грануломорфология: простые 12- и 13-эдры. – Апатиты: Изд-во КНЦ РАН, 2000.
21. *Кюри П.* О симметрии в физических явлениях: симметрия электрического и магнитного полей. Избр. труды. – М.-Л.: Наука, 1966. – С. 95 – 113.
22. *Леммлейн Г.Г.* Морфология и генезис кристаллов. – М.: Наука, 1978.
23. *Мокиевский В.А.* Морфология кристаллов. – Л.: Недра, 1983.
24. *Полиэдрические* формы в живой и косной природе / Ю.Л. Войтеховский, Д.Г. Степенщиков, М.Г. Тимофеева и др. – Апатиты: Изд-во K & M, 2005.
25. *Фёдоров Е.С.* Основания морфологии и систематики многогранников // Зап. Импер. С.-Петербург. минерал. об-ва, 1893. – Ч. 30. – С. 241 – 341.
26. *Фёдоров Е.С.* Симметрия и структура кристаллов. Основные работы. – М.: Изд-во АН СССР, 1949.
27. *Хомяков А.П.* Новейшие минералогические открытия и пересмотр концепции ограниченности числа минеральных видов // Матер. межд. минерал. семинара "Структура и эволюция минерального мира". – Сыктывкар: Геопринт, 1997. – С. 98 – 99.
28. *Шафрановский И.И.* // Зап. ВМО. – 1954. – № 4. – С. 198 – 211.
29. *Шафрановский И.И.* Кристаллы минералов. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1957.
30. *Шафрановский И.И.* Лекции по кристалломорфологии. – М.: Высшая школа, 1968.
31. *Шафрановский И.И.* История кристаллографии. XIX в. – Л.: Наука, 1980.
32. *Шафрановский И.И., Франк-Каменецкий В.А., Доливо-Добровольская Е.М.* (Сост.) Евграф Степанович Фёдоров. Переписка. Неизданные и малоизвестные работы. Сер.: Научное наследство. – Л.: Наука, 1991. – Т. 16.
33. *Шубников А.В.* Избранные труды по кристаллографии. – М.: Наука, 1975.
34. *Юшкин Н.П., Шафрановский И.И., Янулов К.П.* Законы симметрии в минералогии. – Л.: Наука, 1987.
35. *Bouwkamp C.J.* On the dissection of rectangles into squares. Pt I // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. – 1946. – **A 49**. – P. 1176 – 1188; Pt II, III // Proc. Nederl. Akad. Wetensch. – 1946. – **A 50**. – P. 58 – 71, 72 – 78.
36. *Bowen R., Fisk S.* // Math. Comp. – 1967. – **21**. – P. 250 – 252.
37. *Britton D., Dunitz J.D.* // Acta Crystallogr. – 1973. – **A 29**. – P. 362 – 371.
38. *Brückner M.* Vielecke und Vielflaeche. – Leipzig: Teubner, 1900.
39. *Curie P.* // J. de Phys. – 1894. – III. 3. – P. 393 – 416.
40. *Curie P.* // Oeuvres de P. Curie. – Paris, 1908. – P. 118 – 141.
41. *Duijvestijn A.J.W., Federico P.J.* // Math. Comp. – 1981. – **37**. – P. 523 – 532.
42. *Engel P.* // Discrete Math. – 1982. – **41**. – P. 215 – 218.
43. *Engel P.* // Зап. ВМО. – 1994. – № 3. – С. 20 – 25.
44. *Engel P.* // Acta Crystallogr. – 2002. – **A 59**. – P. 14 – 17.
45. *Federiko P.J.* // J. Comb. Theory. – 1969. – N 7. – P. 155 – 161.
46. *Federiko P.J.* // Geometr. Dedicata. – 1975. – **3**. – P. 469 – 481.
47. *Goldschmidt V.* Atlas der Krystallformen. – Heidelberg: Winter, Bd 1, 2 – 1913, Bd 3 – 1916, Bd 4, 5 – 1918, Bd 6 – 1920, Bd 7, 8 – 1922, Bd 9 – 1923.
48. *Grace D.W.* Computer search for non-isomorphic convex polyhedra. / Ph.D. Thesis. Comp. Sci. Dept., Stanford University, California, USA, 1965.
49. *Hermes O.* // J. Reine Angew. Math. – 1899. – **120**. – S. 305 – 353.
50. *Kirkman T.P.* // Proc. Royal Soc. London. – 1862/1863. – **12**. – P. 341 – 380.
51. *Naumann C.F.* Elemente der Mineralogie. 15te Aufl. – Leipzig: Verlag von W. Engelmann, 1907.
52. *Voytekhovsky Y.L.* // Acta Crystallogr. – 2001. – **A 57**. – P. 112 – 113.
53. *Voytekhovsky Y.L.* // Acta Crystallogr. – 2001. – **A 57**. – P. 475 – 477.
54. *Voytekhovsky Y.L.* // Acta Crystallogr. – 2002. – **A 58**. – P. 622 – 623.
55. *Voytekhovsky Y.L.* A formula to estimate the size of a fullerene // Acta Cryst. – 2003. – **A 59**. – P 193 – 194.

56. *Voytekhovsky Y.L.* Fullerenes as possible collectors of noble, rare, and disseminated elements // Minerals as advanced materials I. – Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. – P. 169 – 178.
57. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2001. – **A 57**. – P. 736 – 738.
58. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Cryst. Reports. – 2002. – **47**, N 5. – P. 720 – 722.
59. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2002. – **A 58**. – P. 295 – 298.
60. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2002. – **A 58**. – P. 404 – 407.
61. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2002. – **A 58**. – P. 502 – 505.
62. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2003. – **A 59**. – P. 195 – 198.
63. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2003. – **A 59**. – P. 283 – 285.
64. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2003. – **A 59**. – P. 367 – 370.
65. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2004. – **A 60**. – P. 278 – 280.
66. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2004. – **A 60**. – P. 582 – 584.
67. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2005. – **A 61**. – P. 581 – 583.
68. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2005. – **A 61**. – P. 584 – 585.
69. *Voytekhovsky Y.L., Stepenshchikov D.G.* // Acta Crystallogr. – 2006. – **A 62**. – P. 230 – 232.
70. *Yushkin N.P.* // Зап. ВМО. – 1993. – № 1. – С. 16 – 25.