

А.М. ФРОЛОВ

**ЭНЕРГИЯ  
СЛОЖНЫХ  
ДЕФЕКТОВ**

ТОМ 3

**ДЕФОРМАЦИЯ.  
ЭТАПЫ  
ТРАНСФОРМАЦИИ**



Энергия сложных дефектов. Том 3.  
Деформация. Этапы трансформации

© А. М. Фролов

31 января 2020

**ББК 34.202**  
**Ф-912**

Фролов А. М.

Энергия сложных дефектов. Том 3. Деформация. Этапы трансформации. – Барнаул: Петров, 2020. – 177 с.

В книге представлено развитие идеи взаимодействующих зон для расчета энергии трансформации сложных дефектов в упорядоченных сплавах. Расчет деформационных характеристик в приложении к полиэтилену иллюстрирует универсальность эвристического подхода. Для аспирантов и научных работников, специализирующихся в области физики конденсированного состояния, как ее фундаментальной так и прикладной сфер.

The book presents the development of the idea of interacting zones for calculating the energy of transformation of complex defects in ordered alloys. The calculation of deformation characteristics in the application to polyethylene illustrates the universality of the heuristic approach. For graduate students and researchers specializing in the field of condensed matter physics, both its fundamental and applied fields.

**ISBN 978-5-6044094-4-2**

© А. М. Фролов, 2020

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Множества</b>	<b>9</b>
1.1	Определение . . . . .	9
1.1.1	Представления . . . . .	10
1.1.2	Плоскости . . . . .	11
1.1.3	Зоны . . . . .	11
1.1.4	Размещения . . . . .	12
1.1.5	Определение . . . . .	12
1.1.6	Изменение нумерации . . . . .	13
1.1.7	Точное число дефектов . . . . .	14
1.2	Множества в определении дефектов . . . . .	14
1.2.1	Множество представлений . . . . .	15
1.2.2	Множество плоскостей . . . . .	15
1.2.3	Множество зон . . . . .	18
1.2.4	Проблема соответствия . . . . .	19
1.2.5	Множество дефектов . . . . .	20
1.2.6	Процедура упорядочения . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Деформация</b>	<b>23</b>
2.1	Разложение КПСД . . . . .	23
2.1.1	КПСД D . . . . .	23
2.1.2	КПСД DD . . . . .	24
2.1.3	КПСД DDD . . . . .	28
2.1.4	КПСД DDDD . . . . .	38
2.1.5	КПСД DDDDD . . . . .	61
2.1.6	Упорядочение законов взаимодействия . . . . .	102
2.1.7	Набор КПСД в DDDDD . . . . .	103
2.2	Деформация . . . . .	103
2.2.1	Теоритическое обоснование . . . . .	103
2.2.2	Энергия КПСД от сдвига . . . . .	105
2.2.3	Первая производная . . . . .	106
2.2.4	Вторая производная . . . . .	107

2.2.5	Потенциал . . . . .	108
2.2.6	Энергия КПСД в полярных координатах . . . . .	108
<b>3</b>	<b>Трансформация</b>	<b>111</b>
3.1	Эволюция . . . . .	112
3.1.1	Задача . . . . .	112
3.1.2	Графики . . . . .	113
3.1.3	Потенциал . . . . .	113
3.1.4	Приоритетное направление расщепления . . . . .	114
3.1.5	Варианты расщепления . . . . .	117
3.1.6	Потенциальный барьер . . . . .	117
3.2	Проблема Штейнера . . . . .	119
3.2.1	Результулирующие матрицы . . . . .	120
3.2.2	Плоскости . . . . .	121
3.2.3	Величины энергий . . . . .	121
3.2.4	Компоненты . . . . .	123
<b>4</b>	<b>Отображения в дефектах</b>	<b>139</b>
4.1	Строка генерации . . . . .	139
4.1.1	Алгоритм нахождения . . . . .	140
4.1.2	Классы . . . . .	143
4.1.3	Обратное связывание . . . . .	144
4.1.4	Строки генерации в примерах . . . . .	150
4.2	Пример связывания . . . . .	161
4.3	Приложения теории графов . . . . .	165
4.3.1	Дерево как классификатор дефектов . . . . .	165
4.3.2	Простые графы и строение дефектов . . . . .	166
4.3.3	Матрицы сильно связные по Форнебиусу . . . . .	167

**Символы, обозначающие геометрические фигуры и отношения между ними**

Обозначения геометрических фигур:

$\Phi$  — геометрическая фигура;

$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots, \zeta, \eta, \theta, \dots$  — плоскости, расположенные в пространстве;

$\alpha^+, \alpha^-$  — положительное и отрицательное полупространства, определяемые плоскостью  $\alpha$ ;

1, 2, 3, 4, ..., 12, 13, 14, ... — зоны пространства, ограниченные плоскостями.

**Символы взаиморасположения геометрических объектов:**

$\in, \subset, \supset$  — принадлежность;

$\equiv$  — совпадение;

$\parallel$  — параллельность;

$\perp$  — перпендикулярность;

$\cap$  — пересечение;

$\cup$  — объединение;

$\sim$  — подобие;

$\cong$  — конгруэнтность;

$=$  — равенство;

$/$  — отрицание, например  $\not\sim$  отрицание подобия.

**Символы, обозначающие логические операции:**

$\wedge$  — конъюнкция предложений, (соответствует союзу «и»);

$\vee$  — дизъюнкция предложений, (соответствует союзу «или»);

$\Rightarrow \Leftarrow$  — импликация, логическое следствие;

$\Leftrightarrow$  — логическая эквивалентность.

**Символы, обозначающие матрицы:**

$N$  — матрица дефекта размерности 0;

$U$  — матрица дефекта размерности 1;

$D$  — матрица дефекта размерности 2;

$M$  — матрица дефекта смешанной размерности;

$R$  — матрица результирующая.

**Символы, обозначающие наборы:**

$\{1, 2, 3, 4, \dots, 12, 13, 14, \dots\}$  — представления;

$(1, 2, 3, 4, \dots, 12, 13, 14, \dots)$  — матрица строка;

$\langle 1, 2, 3, 4, \dots, 12, 13, 14, \dots \rangle$  — конфигурация.

Отношения множеств:

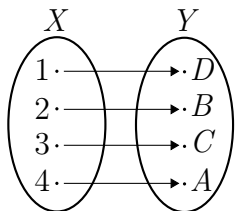


Рис. 1: Биекция

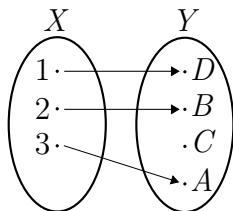


Рис. 2: Инъекция

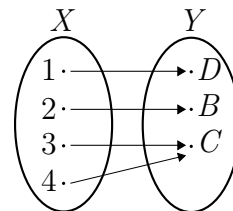


Рис. 3: Суръекция

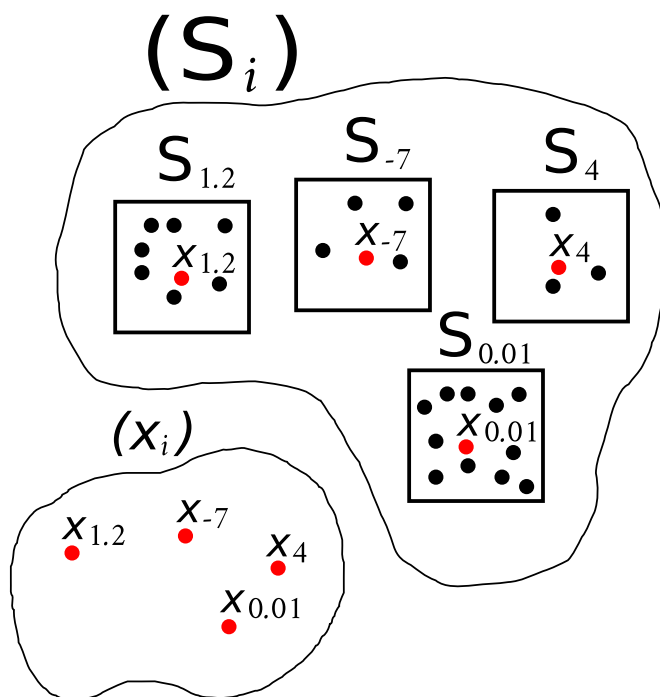


Рис. 4: Аксиома выбора



# Предисловие

Перед Вами третий Том издания, посвященного энергии сложных дефектов. Ранее подробно были рассмотрены примеры расчета энергии обособленных, статичных дефектов, вне всякой связи между собой.

Распространим подход взаимодействующих зон на объекты другого рода. Будем рассматривать пару фрагментов кристалла, которые взяты из процесса кристаллогеометрических превращений, связанных между собой. Такие превращения соответствуют эволюции, различным трансформациям дефектов в кристалле.

Так же есть возможность смоделировать пластическую деформацию, которая поддается формальному описанию в виде сложных дефектов. Эта симуляция динамического процесса охватывает много, более двух фрагментов кристалла, отличных между собой.

Таким образом, если рассматривать задачи, использующие энергию дефектов с точки зрения протяженности во времени, то имеем одномоментный вариант, соответствующий дефектам-телам Платона и Архимеда. Далее следует бивариант, соответствующий трансформации. Наконец много моментный набор сложных дефектов, позволяющий рассчитать некоторые деформационные характеристики кристаллов.

В следующих Главах подробно рассматривается решение кристаллогеометрической задачи, подтверждающей или опровергающей предположение о том, что сложный дефект после расщепления, трансформации обладает меньшей энергией. Задача вообще никак не решалась, пока прокручивалась на уровне конкретных атомов у конкретных дефектов.

На сколько вообще сложен ответ на поставленный вопрос? Как оказалось к процессу расщепления можно подойти с двух сторон. Во первых это частный случай для особо ориентированных плоскостей при котором разные части дефектов имеют одинаковую энергию. Его удается охарактеризовать графиками, позволяющими наиболее просто судить о возможном качественном исходе процесса. На основе полученных результатов возможно прогнозирование в некоторых сверхструктурах как изначально стабильных, так и не стабильных конфигураций.

Во вторых рассматривается случай в приложении проблемы Штейнера к дефектам в кристалле. Здесь простой интерпретации результатов графиками достигнуть не удалось. В прочем, этот пример скорее иллюстративного характера, демонстрирующий возможности метода взаимодействующих зон.

Здесь и далее по тексту будем использовать аббревиатуру для комплекс планарных сверхструктурных дефектов — КПСД. Первая Глава рассматривает определение КПСД с точки зрения теории бесконечного. Хотелось бы сказать про обозначения, касающиеся математических выражений в Главе о множествах. Они совпадают с общепринятыми, приведенными в [11].

Во второй Главе приводится процедура разложения на элементы произвольного, в пределе бесконечного КПСД.

В конце приведены некоторые библиографические источники, используемые для написания третьего Тома издания, посвященного энергии сложных дефектов.

Андрей Фролов. Январь 2020 г. [phys.mocate@yandex.ru](mailto:phys.mocate@yandex.ru).

# Глава 1

## Множества в определении комплекса планарных сверхструктурных дефектов

В первом Томе издания, посвященного сложным дефектам уже давалось определение КПСД. Это было сделано в тех обозначениях, которые позволяли первоначально очертить существо вопроса. Чтобы более ясно представить себе КПСД, переведем их в формальные понятия, которыми вот уже более столетия пользуются математики при рассмотрении конечных и бесконечных множеств. Выбор такого способа представления логичен, ведь и общее число дефектов безгранично. Другим аспектом, подводящим нас к теории бесконечного является использование аппарата сочетаний и размещений в определении дефекта. Его применение, как правило, почти всегда рука об руку идет с теорией бесконечных множеств. Начнем с повторения, а именно с вводного определения комплекса планарных сверхструктурных дефектов.

### 1.1 Определение КПСД

Начнем рассмотрение проблем, связанных с определением комплексов планарных сверхструктурных дефектов. Далее речь будет вестись только о *комплексах планарных сверхструктурных дефектов* (сокращенно КПСД) и только о них. С помощью определения понятия раскрывается его содержание [3]. Что же содержит в себе КПСД? Это прежде всего понятие сверхструктуры с евклидовым пространством, декартовой системой координат и прямоугольным правосторонним ортонормированным базисом, на котором задается та или иная решетка с элементарной ячей-

кой, порождающей ее и всегда содержащей более одного сорта атомов. Это плоскость или плоскости однозначно описываемые общим уравнением в декартовой системе координат из предыдущего шага. Результатом пересечения плоскостей евклидова пространства будут зоны, которые так же являются неотъемлемой частью определения КПСД. Математический аппарат размещений комбинаторики [4] позволяет раскрыть наши понятия в едином ключе и органично использовать их в определении КПСД.

### 1.1.1 Представления сверхструктуры

Сверхструктура порождает КПСД вследствие того, что имеет несколько геометрически различных, но энергетически эквивалентных способа представления. Задача нахождения числа таких способов решена в [1]. Представления описываются при помощи подстановок. В неявном виде подстановка определяет решетку, на которой строится элементарная ячейка сверхструктуры а так же декартову систему координат с правосторонним ортонормированным базисом. Обозначим общее число представлений через  $n$ . Приведем эти представления в виде подстановок для сверхструктуры  $B2$ , для которой  $n = 2$ :

$$AB, BA. \quad (1.1)$$

Получим двухэлементное множество представлений:

$$\{1, 2\}. \quad (1.2)$$

Для сверхструктуры  $L1_2$   $n = 4$ :

$$ABBB, BABB, BBAB, BBBA. \quad (1.3)$$

Множество представлений:

$$\{1, 2, 3, 4\}. \quad (1.4)$$

Для сверхструктуры  $L1_0$   $n = 6$ :

$$AABB, ABAB, ABBA, BAAB, BABA, BBAA. \quad (1.5)$$

Множество представлений:

$$\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}. \quad (1.6)$$

### 1.1.2 Плоскости формирующие комплекс

Известно общее уравнение плоскости в декартовой системе координат:

$$\alpha : F(x, y, z) \equiv A(x - x_0) + B(y - y_0) + C(z - z_0) = 0. \quad (1.7)$$

Пусть плоскость  $\alpha$  разбивает пространство кристаллической решетки, заполненной атомами более одного сорта, на два полупространства. Первое состоит из всех точек  $M = (x, y, z)$ , для которых  $F(x, y, z) < 0$ . Второе полупространство состоит из всех точек  $M = (x, y, z)$ , для которых  $F(x, y, z) \geq 0$  [5]. Будем говорить о двух «состояниях» многочлена  $F(x, y, z)$ . В первом многочлен определяет отрицательное евклидово полупространство, во втором неотрицательное. Отрицательное полупространство обозначим как  $\alpha^-$ , неотрицательное как  $\alpha^+$ . Как правило для формирования комплекса используется более одной плоскости. Общее число плоскостей обозначим через  $m$ .

### 1.1.3 Зоны формируемые плоскостями

Необходимо знать число зон, формируемых плоскостями. Зоны получим как результат пересечения полу пространств, определяемых положительным или отрицательным полупространством соответствующих плоскостей. Из комбинаторики известно, что  $m$  многочленов, которые могут принимать два различных «состояния» возможно подставить в размещения, описывающие зону, с повторениями  $X$  способами, где:

$$X = \bar{A}_2^m = 2^m. \quad (1.8)$$

Число элементов размещений равно числу плоскостей. Некоторые размещения при этом могут определять вырожденные, мнимые зоны. Для примера определим зоны для двух плоскостей  $\alpha$  и  $\beta$ , формирующих четыре зоны:

$$\begin{aligned} &1(\alpha^+ \cap \beta^+), \\ &2(\alpha^+ \cap \beta^-), \\ &3(\alpha^- \cap \beta^+), \\ &4(\alpha^- \cap \beta^-). \end{aligned} \quad (1.9)$$

Если плоскости параллельны, то одно из размещений определяет вырожденную зону. Число невырожденных зон равно 3. Для определения комплексов будем использовать сквозную нумерацию невырожденных зон. Обозначим общее число невырожденных зон через  $k$ . Рассмотрим

некоторые варианты комбинаций плоскостей. Одна плоскость делит евклидово пространство на две зоны. Для первой из них многочлен отрицателен, для второй не отрицателен. Отсутствие плоскости дает одну зону, охватывающую все пространство. Две и более плоскости формируют несколько (более двух) зон.

#### 1.1.4 Понятие конфигурации

Из комбинаторики известно, что  $n$  представлений сверхструктуры возможно разместить по  $k$  зонам с повторениями  $Y$  способами, где:

$$Y = A_n^k = n^k. \quad (1.10)$$

Размещение представлений по зонам назовем сверхструктурным размещением или *конфигурацией*. Число элементов в размещении равно числу невырожденных зон пространства кристалла. Такая конфигурация однозначно определяет дефект, если представления сверхструктуры и зоны кристалла определены заранее. Все они образуют конечное множество всех дефектов, порождаемых нашими плоскостями, уравнения которых известны. Для примера приведем такое множество для трех представлений по двум зонам:

$$\langle 1, 1 \rangle, \langle 1, 2 \rangle, \langle 1, 3 \rangle, \langle 2, 1 \rangle, \langle 2, 2 \rangle, \langle 2, 3 \rangle, \langle 3, 1 \rangle, \langle 3, 2 \rangle, \langle 3, 3 \rangle. \quad (1.11)$$

Здесь номерам соответствуют представления, положение номера представления в размещении соответствует номеру зоны. Первая, пятая и девятая конфигурации — идеальные кристаллы. Оставшиеся конфигурации — планарные дефекты.

#### 1.1.5 Определение комплекса планарных дефектов

*Комплексом планарных сверхструктурных дефектов называется представитель множества  $k$ -элементных размещений с повторениями из  $n$ -элементного множества представлений.*

Повторим еще раз, что число элементов конфигурации равно числу невырожденных зон, формирующих дефект. Элементы конфигурации определяются представлениями сверхструктуры, порождающими решетку. Все множество конфигураций распадается на идеальные кристаллы, планарные дефекты и, собственно, сами КПСД. Используя лишь номера зон и представлений в сверхструктурном размещении мы, тем самым,

сделали переход от конкретных комплексов к абстрактным. Абстрактные комплексы не учитывают внутреннюю структуру дефектов. Они не «привязаны» к системе координат или форме и размеру зон. Как будет показано далее такая абстракция дает базу для последующей классификации КПСД. Критерием классификации выступит *способ расчета энергии* дефекта.

### 1.1.6 Проблема нумерации зон

На порядок нумерации зон не накладывались ограничения. Она может быть произвольной в том смысле, что мы всегда сможем найти однозначное соответствие между конфигурациями, отличающимися лишь этим порядком. Найдем сверхструктурное размещение с нумерацией зон, отличной от приведенной. Назовем это размещение искомым. Перемена нумерации приведет к перестановке элементов в исходном сверхструктурном размещении. К примеру поменяем номера второй и третьей зон. Предлагается способ нахождения искомого размещения из исходного используя аппарат перестановок и подстановок теории групп, который изложен в [6]. О подстановке мы говорим в том случае, если, например, от перестановки 1234 требуется перейти к перестановке 1324. Любая подстановка допускает разложение в произведение независимых циклов. Так для данного случая подстановку можно записать в виде произведения не пересекающихся циклов  $(1)(2, 3)(4)$  которое интерпретируется как замена номера третьей зоны на второй, а номера второй зоны на третий, первый и четвертый номера зон остаются без замены. Соответствующая матрица подстановки запишется в виде:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

В этом случае удобно представить размещение в виде матрицы строки. Умножая строку исходного размещения, или, другими словами, исходной сверхструктурной конфигурации на матрицу  $M$  справа мы поменяем соответствующие элементы. Исходное сверхструктурное размещение запишем в виде матрицы строки:

$$A_1 = (1 \quad 1 \quad 2 \quad 2). \quad (1.13)$$

Искомое сверхструктурное размещение получится из выражения произведения матриц:

$$A_2 = A_1 M = (1 \ 2 \ 1 \ 2). \quad (1.14)$$

### 1.1.7 Точное число дефектов

Для идеального кристалла, то есть кристалла без дефекта сверхструктурное размещение содержит только одно представление для всех зон. Число размещений равно общему числу представлений сверхструктуры  $n$ . Повторим, что все элементы конфигурации одинаковы.

Для планарного дефекта сверхструктурное размещение содержит только два представления, причем одно представление размещается по зонам, принадлежащим отрицательному полупространству фиксированной плоскости, второе представление размещается по зонам, принадлежащим неотрицательному полупространству этой плоскости. Число размещений равно:

$$m(n^2 - n). \quad (1.15)$$

Первый член в скобке — это число размещений с повторениями  $n$  представлений по двум полупространствам для каждого многочлена. Элементы конфигурации, то есть представления сверхструктуры в этом случае только двух видов. КПСД — это все остальные сверхструктурные размещения из полученного множества. Число размещений равно:

$$n^k - m(n^2 - n) - n. \quad (1.16)$$

Полученное выражение для точного количества комплексов справедливо и для граничных условий, когда в кристалле реализуется случай только с планарным сверхструктурным дефектом или идеальной решеткой.

## 1.2 Множества в определении дефектов

Множества счетные, несчетные, множества ординарные, экстраординарные — все это основа теории. Мы же в качестве искомого выберем мощность каждого бесконечного множества в определении КПСД. Прежде всего нас будет интересовать счетно оно или континуально. Так же оговорим процедуру упорядочения. В этом контексте не применим коснуться такой категории бесконечных множеств, как ординал.



### 1.2.1 Множество представлений

Известно, что сверхструктура порождает КПСД вследствие того, что имеет несколько геометрически различных, но энергетически эквивалентных способа представления. Представления описываются при помощи подстановок. Повторим, что в неявном виде подстановка определяет решетку, на которой строится элементарная ячейка сверхструктуры а так же декартову систему координат с правосторонним ортонормированным базисом. Предметом дальнейших рассуждений выберем простую сверхструктуру  $B2$ , характерную для металлов с кубической симметрией и органично вписывающуюся в дальнейшее изложение.

Для сверхструктуры  $B2$  число представлений равно 2:

$$AB, BA. \quad (1.17)$$

В обозначениях теории множеств такое положение вещей имеет вид  $B2 = \{AB, BA\}$ . Рассмотрим теперь конечное множество булевых значений  $\{0, 1\}$ . Мощность конечного множества равна числу его элементов, следовательно  $|B2| = 2$ . Отображение между этими множествами есть биекция  $f: B2 \rightarrow \{0, 1\}$ .

### 1.2.2 Множество плоскостей

Произвольный дефект формируется набором из бесконечного множества плоскостей трехмерного евклидова пространства. Общее уравнение плоскости в декартовой системе координат, привязанной к выбранной сверхструктуре:

$$\alpha : F(x, y, z) \equiv A(x - x_0) + B(y - y_0) + C(z - z_0) = 0. \quad (1.18)$$

Используем индуктивный метод, приводя на первом этапе рассуждения для одномерного пространства, в котором общее уравнение плоскости:

$$\alpha : F(x) \equiv A(x - x_0) = 0. \quad (1.19)$$

Данная плоскость  $\alpha$  разбивает пространство кристаллической решетки, заполненной атомами более одного сорта, на два полупространства. Первое состоит из всех точек  $M = (x)$ , для которых  $F(x) < 0$ . Второе полупространство состоит из всех точек  $M = (x)$ , для которых  $F(x) \geq 0$

[5]. Обозначим за  $r_1$  отрицательное полупространство, за  $r_2$  неотрицательное. Введение плоскости делает пространство бинарным. В обозначениях теории множеств пространство после введения плоскости становится двухэлементным, то есть  $R = \{r_1, r_2\}$ . Рассмотрим теперь конечное множество булевых значений  $\{0, 1\}$ . Отображение между этими множествами есть биекция  $f: R \rightarrow \{0, 1\}$ .

Сколько всего плоскостей необходимо для формирования всех комплексов планарных сверхструктурных дефектов, другими словами какова мощность множества плоскостей, формирующих их? Попробуем ответить на этот вопрос.

Произвольному дефекту соответствует подмножество множества плоскостей

$$P = \{p_1, p_2, \dots, p_n, \dots\}.$$

В одно-мерном пространстве для описания плоскости в общем случае используется два действительных числа - одно для нормали и одно для точки через которую проходит плоскость. Такой вариант равно мощен по числу элементов континууму, чему соответствует запись вида  $|P| = c$ .

Но так ли это в случае со сверхструктурными дефектами? Выбирая сверхструктуру мы тем самым договариваемся, что не все точки евклидова пространства одинаковы — оно становится дискретным. Атом не может находиться в любой точке пространства, а только в точках согласно параметру решетки. Тем самым мы рассматриваем подмножество точек пространства в которых находятся атомы из множества всех точек пространства. Это первое условие накладываемое на пространство, первоначально континуальное. Вторым дополнительным условием выбора запретим произвольному атому принадлежать двум полу пространствам любой плоскости одновременно. Формулировка этого условия выбора вытекает из постановки самой задачи описания планарных комплексов. В противном случае сорта половин одного атома могут не совпадать. От-

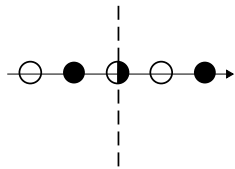


Рис. 1.1: Левый запрет

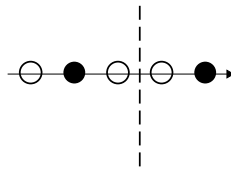


Рис. 1.2: Разрешено

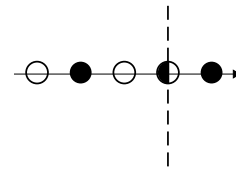


Рис. 1.3: Правый запрет

метим тот факт, что в кристалле имеются плоскости. Отметим и то, что расчет энергии фигуры, ограниченной например поверхностью второго

порядка всегда выше, чем близкой ей фигуры построенной из плоскостей. Такая, своего рода, дискриминация в выборе расположения границы дефекта отражает некую природу рассматриваемого объекта. Ясно, что такое положение вещей дают нам бесконечное множество координат плоскостей, равно мощное натуральному ряду чисел, то есть в нашем случае  $|x_0| = |\mathbb{N}|$ . Другими словами, из семейства координат плоскостей, лежащих в любом единичном интервале необходимо и достаточно рассматривать только одну координату этого интервала — предпочтительно медианную, как наиболее вероятную. Плоскость дефекта, являясь по своей природе континуальной, отличается от любой плоскости кристалла, в которой имеются особые дискретные точки, отвечающие за положение атома.

Эти же доводы правомочны для выбора нормали наших плоскостей. Выразим это математически.

Пространство — множество всех действительных точек:

$$S = \{x | x \in \mathbb{R}\}.$$

Уравнение безусловной плоскости:

$$\alpha(x_0) = \{x : A(x - x_0) = 0 | x \in S \wedge A \in \mathbb{R}\}.$$

Уравнение условной плоскости:

$$\alpha(x_0) = \{x : A(x - x_0) = 0 | x \in S \wedge A \in \mathbb{Z} \wedge x_0 \in \mathbb{Z} + 1/2\}.$$

По индукции, рассматривая двух-мерное и трех-мерное пространство, произвольную нормаль возможно описать двойкой и тройкой натуральных чисел. Произвольную координату, через которую проходит плоскость возможно описать двойкой и тройкой рациональных чисел.

В заключении наших логических построений приходим к выводу что множество плоскостей, необходимых для описания комплексов планарных сверхструктурных дефектов описывается тройками натуральных и тройками рациональных чисел, является подмножеством множества всех плоскостей

$$P_{discr} \in P = \{p_1, p_2, \dots, p_n, \dots\},$$

которые описываются шестерками действительных чисел. Используя теоремы теории множеств легко показать, что мощность множества троек натуральных и троек рациональных чисел по мощности равна множеству натуральных чисел, то есть счетно

$$|P_{discr}| = |\mathbb{N}|.$$

Повторим, что каждая плоскость связана с полу пространствами с биекцией  $f: R \rightarrow \{0, 1\}$ .

### 1.2.3 Множество зон

Определимся с числом зон, формируемых плоскостями любого комплекса планарных сверхструктурных дефектов. Пространственно интуитивно понятно определение зоны, как геометрического места точек, которые определяет запись из произвольного набора полей и единиц, соответствующих пересечению точек положительных и отрицательных полу пространств плоскостей, положение которых в этом наборе соответствует номеру плоскости из их множества — ведь оно счетно. Выразим это математически. Согласно показанной ранее биекции  $f: R \rightarrow \{0, 1\}$  множество  $\{0, 1\}^\omega$  и множество полу пространств связано биекцией:

$$\{a_1, a_2, \dots, a_n, \dots\}, a_i \in \{0, 1\} \forall i \geq 1,$$

$$\{c_1, c_2, \dots, c_n, \dots\}, c_i \in \{r_1, r_2\} \forall i \geq 1,$$

где  $c_n$  — полупространство, соответствующее плоскости  $n$ .

Тогда одна произвольная зона — это

$$\bigcap_i c_i.$$

Мощности множеств, связанных биекцией равны. Можно показать, что мощность множества произвольных наборов полей и единиц равна мощности континуума. Число всех зон любого комплекса сверхструктурных дефектов равно, соответственно числу всех возможных наборов, то есть:

$$|X| = 2^{\aleph}. \quad (1.20)$$

Некоторые размещения при этом могут определять вырожденные, мнимые зоны. Для примера определим зоны для двух плоскостей  $\alpha$  и  $\beta$ , формирующих четыре зоны:

$$\begin{aligned} x_1 &= \{0, 0\} \\ x_2 &= \{1, 0\} \\ x_3 &= \{0, 1\} \\ x_4 &= \{1, 1\}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Если плоскости параллельны, то одно из размещений определяет вырожденную зону. Число невырожденных зон равно 3. Для определения дефекта будем использовать невырожденные зоны. Это дополнительное условие выбора делит множество зон на подмножество невырожденных и

подмножество вырожденных зон. И если мощность множества зон равна континууму, то согласно теоремам теории множеств, мощность подмножеств множества может быть и не равна ему.

Определим мощность подмножества невырожденных зон множества зон.

В случае одно-мерного пространства плоскости дефекта соответствует точка числовой прямой. Вообще размерность объекта, выступающего в качестве плоскости в дефектах для пространств различной размерности  $n$  равна  $n - 1$ . Положительному полупространству соответствует правый луч, отрицательному левый. Зона получается как результат пересечения всех таких лучей. Соответственно задача нахождения числа зон сводится к задаче нахождения числа отрезков прямой на которой расположено  $P$  точек. Этому соответствует формула вида

$$x_N = P + 1.$$

Мощность подмножества невырожденных зон  $|x_N| = |\mathbb{N}|$ . Мощность подмножества невырожденных зон равна мощности множества натуральных чисел. Мощность подмножества вырожденных зон  $x_V = X \setminus x_N$ :

$$|x_V| = |\mathbb{R}|.$$

То есть ситуация резко меняется считаем ли мы вырожденные зоны в определении дефекта или не считаем.

Можно показать, что для случаев размерности пространства два и три получается аналогичный результат. Условно выражения для числа вырожденных зон для различных случаев размерности рассматриваемого пространства:

$$2^{\mathbb{N}} - \mathbb{N}^1;$$

$$2^{\mathbb{N}} - \mathbb{N}^2;$$

$$2^{\mathbb{N}} - \mathbb{N}^3.$$

#### 1.2.4 Проблема соответствия

Важным моментом выше изложенного является соответствия плоскостей, формирующих зоны произвольного дефекта. Вынесенную в отдельный подраздел проблему наиболее просто характеризует следующая иллюстрация. Если рассматривать все плоскости одного направления в совокупности с им перпендикулярными, то формируемые таким образом зоны содержат в себе атомы только для первого набора. Далее только

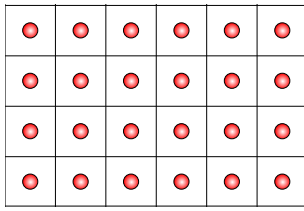


Рис. 1.4: Набор 100

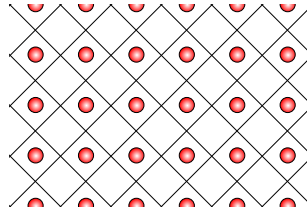


Рис. 1.5: Набор 110

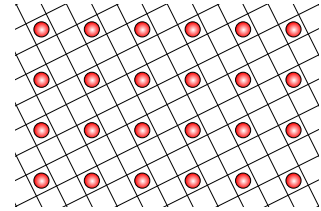


Рис. 1.6: Набор 120

каждая вторая из них не пуста. В третьем случае — только каждая пятая. По индукции следует, что количество пустых зон растет как квадрат направления. Необходимо дополнительным условием отбора плоскостей, формирующих комплекс планарных сверхструктурных дефектов требовать отсутствие зон без атомов. Краевое условие — наличие в любой зоне КПСД хотя бы одного атома.

### 1.2.5 Множество дефектов

Напомним определение конечного дефекта:

*Комплексом планарных сверхструктурных дефектов называется представитель множества  $k$ -элементных размещений с повторениями из  $n$ -элементного множества представлений.*

Повторим так же, что отображение между множеством представлений и  $\{0, 1\}$  есть биекция

$$f: B2 \rightarrow \{0, 1\}.$$

Тогда согласно показанной биекции и определению любой дефект через отображение соответствует какому либо набору из  $\{0, 1\}^\omega$  :

$$\{a_1, a_2, \dots, a_n, \dots\}, a_i \in \{0, 1\} \forall i \geq 1,$$

$$\{c_1, c_2, \dots, c_n, \dots\}, c_i \in \{AB, BA\} \forall i \geq 1.$$

Здесь никакие наши ухищрения не позволят понизить мощность множества всех дефектов. Из сказанного выше следует, что мощность множества всех комплексов планарных сверхструктурных дефектов, определенных на любой конечной сверхструктуре при специальном выборе плоскостей и учете только невырожденных зон равна мощности континуума.

### 1.2.6 Процедура упорядочения

Ординалы, или порядковые числа, позволяют выразить более тонкую классификацию множеств, основанную на информации об их упорядочении. Если же принять утверждение о том, что каждое множество можно вполне упорядочить, то таким инструментом может служить *Аксиома выбора*. Приведем процедуры выбора, или упорядочения для рассматриваемых нами множеств. Для простоты изложения рассмотрим 1-мерное пространство.

Множество представлений конечно, поэтому упорядочено априори. Множество плоскостей поддается упорядочению так же, как и множество целых чисел, если определить нестандартное отношение меньше или равно. Множество зон будет упорядочено в том случае, если оговорить, какое из полупространств рассматривать в первую очередь. Пускай для определенности это будет отрицательное полупространство. Можно сказать, что оставшееся множество всех дефектов так же упорядочено. Это утверждение — следствие возможности использования над множеством *Аксиомы выбора*.

**Алгоритм 1.** 1. *Задается множество представлений. Оно конечно.*

*Ему ставится в соответствие конечный начальный отрезок множества натуральных чисел.*

2. *Перечисляются все законы взаимодействия.*
3. *На первом этапе берутся тройки натуральных в совокупности с тройками рациональных чисел соответствующие плоскостям.*
4. *На втором этапе берутся пары троек натуральных в совокупности с тройками рациональных чисел соответствующие двум плоскостям и так далее.*
5. *Для всех невырожденных зон, сформированных на каждом этапе делается перебор вариантов представлений порождающих дефект.*
6. *К полученным конфигурациям применяется процедура разложения на компоненты.*
7. *В заключении дефект относится к конкретному классу согласно способа расчета энергии. Генерирующая функция позволяет сделать это однозначно.*

Как правило конкретная задача требует упорядочения лишь отчасти. Ведь приходится рассматривать отдельную конечную конфигурацию. Достаточно задать процедуру упорядочения например для зон выбранного планарного сверхструктурного дефекта. Так легче всего будет потом определять строку генерации, если это потребуется. Для плоскостей и компонентов процедуру можно опустить в следствии того, что их число будет конечно. Напомним, что любое конечное множество уже упорядочено.



## Глава 2

# Деформация

Переходя к поиску закономерностей деформационных характеристик кристаллов отметим универсальность подхода взаимодействующих зон. Попробуем с его помощью провести как количественный, так и достоверный качественный анализ результатов расчетов. В таких категориях можно будет предполагать наличие некоторых свойств и даже прогнозировать поведение различных материалов, не только металлов и их сплавов, но и полимеров.

### 2.1 Полное разложение КПСД

Успешность решения ряда прикладных задач кристаллофизики с использованием подхода *MOSATE* является следствием наличия самой возможности представления сложного дефекта как совокупности простых. В этой Главе мы на практике представим разложение параллельных дефектов и сделаем обоснование такой возможности даже для бесконечного набора планарных компонентов, если пока не брать в рассмотрение их пересечения. Получим, в некотором смысле, частное доказательство для планарных несовершенств, отобразив их в одномерное пространство. Сделаем попытку получить все возможные такие компоненты КПСД на примере двухкомпонентной сверхструктуры  $B_2$ .

#### 2.1.1 КПСД D

Базовый компонент, присутствующий так или иначе во всех КПСД.

Конфигурация:

$$Conf = \langle 1, 2 \rangle, \quad (2.1)$$

использующая набор представлений  $\{1,2\}$ . Матрицы взаимодействия — результат действия функции:

$$Res(Conf) = \dot{D}_1^a, \ddot{D}_1^a. \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Нижний индекс соответствует номеру компонента в данной работе.

### 2.1.2 КПСД DD

Конфигурация:

$$Conf = \langle 1, 2, 3 \rangle, \quad (2.4)$$

использующая набор представлений  $\{1,2,3\}$ . Матрицы взаимодействия — результат действия функции:

$$D_2^a = Gen((1, 2, 2), D_1^a). \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$D_3^c = Gen((1, 1, 2), D_1^a). \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_3^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_3^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_3^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$Res(Conf) = R_4^a, R_5^b, R_6^c. \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_4^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_4^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_4^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_5^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_5^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_5^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_6^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_6^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_6^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Тогда:

$$DD_7^a = R_4^a - D_2^a. \tag{2.13}$$

$$DD_8^b = R_5^b. \tag{2.14}$$

$$DD_9^c = R_6^c - D_3^c. \tag{2.15}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_7^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_7^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_7^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_8^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_8^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_8^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_9^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_9^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_9^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.18}$$

При свертке к закону взаимодействия  $a$  матрица, соответствующая закону  $b$  уничтожается, аннигилирует. Матрица, соответствующая закону  $c$  транспонируется.

$$DD_{10}^a = DD_9^{-c} = (DD_9^c)^T. \tag{2.19}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{10}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{10}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{10}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Искомое взаимодействие:

$$DD_{11}^a = DD_7^a + DD_{10}^a. \tag{2.21}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{11}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{11}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{11}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

### 2.1.3 КПСД DDD

Конфигурация:

$$Conf = \langle 1, 2, 3, 4 \rangle, \quad (2.23)$$

использующая набор представлений  $\{1, 2, 3, 4\}$ . Матрицы взаимодействия — результат действия функции:

$$D_{12}^a = Gen((1, 2, 2, 2), D_1^a). \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_{12}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_{12}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_{12}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$D_{13}^c = Gen((1, 1, 2, 2), D_1^a). \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_{13}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_{13}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_{13}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$D_{14}^f = \text{Gen}((1, 1, 1, 2), D_1^a). \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_{14}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_{14}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_{14}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$DD_{15}^a = \text{Gen}((1, 2, 3, 3), DD_7^a). \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \dot{DD}_{15}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DD}_{15}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DD_{15}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$DD_{16}^b = \text{Gen}((1, 2, 3, 3), DD_8^b). \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{16}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{16}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{16}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.33}$$

$$DD_{17}^c = Gen((1, 2, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.34}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{17}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{17}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{17}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

$$DD_{18}^c = Gen((1, 1, 2, 3), DD_7^c). \tag{2.36}$$



$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{18}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{18}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{18}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

$$DD_{19}^e = Gen((1, 1, 2, 3), DD_8^b). \tag{2.38}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{19}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{19}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{19}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.39}$$

$$DD_{20}^f = Gen((1, 1, 2, 3), DD_9^c). \tag{2.40}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{20}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{20}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{20}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.41}$$

$$Res(Conf) = R_{21}^a, R_{22}^b, R_{23}^c, R_{24}^d, R_{25}^e, R_{26}^f. \tag{2.42}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{21}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{21}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{21}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{22}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{22}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{22}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{23}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{23}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{23}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.45}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{24}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{24}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{24}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.46}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{25}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{25}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{25}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.47}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{26}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{26}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{26}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.48}$$

Тогда:

$$DDD_{27}^a = R_{21}^a - D_{12}^a - DD_{15}^a. \tag{2.49}$$

$$DDD_{28}^b = R_{22}^b - DD_{16}^b. \tag{2.50}$$

$$DDD_{29}^c = R_{23}^c - D_{13}^c - DD_{17}^c - DD_{18}^c. \tag{2.51}$$

$$DDD_{30}^d = R_{24}^d. \tag{2.52}$$

$$DDD_{31}^e = R_{25}^e - DD_{19}^e. \tag{2.53}$$

$$DDD_{32}^f = R_{26}^f - D_{14}^f - DD_{20}^f. \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDD}_{27}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDD}_{27}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDD_{27}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDD}_{28}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDD}_{28}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDD_{28}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{29}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{29}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{29}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.57}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{30}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{30}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{30}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.58}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{31}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{31}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{31}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D_{32}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D_{32}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D_{32}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.60}$$

При свертке к закону взаимодействия  $a$  матрицы, соответствующие законам  $b, e$  уничтожаются, аннигилируют. Матрица, соответствующая закону  $c$  транспонируется.

$$D D D_{33}^a = D D D_{29}^{-c} = (D D D_{29}^c)^T. \tag{2.61}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D_{33}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D_{33}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D_{33}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.62}$$

Матрица, соответствующая закону  $d$  переходит в  $a$  без изменений. Матрицы, соответствующие законам  $a, f$  в результате равны нулевой.

Искомое взаимодействие:

$$D D D_{34}^a = D D D_{30}^a + D D D_{33}^a. \tag{2.63}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DD_{34}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DD_{34}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{34}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.64}$$

#### 2.1.4 КПСД DDDD

Конфигурация:

$$Conf = \langle 1, 2, 3, 4, 5 \rangle, \tag{2.65}$$

использующая набор представлений  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Матрицы взаимодействия — результат действия функции:

$$D_{35}^a = Gen((1, 2, 2, 2, 2), D_1^a). \tag{2.66}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{35}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{35}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{35}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.67}$$



$$D_{36}^c = \text{Gen}((1, 1, 2, 2, 2), D_1^a). \quad (2.68)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_{36}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_{36}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_{36}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$D_{37}^f = \text{Gen}((1, 1, 1, 2, 2), D_1^a). \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_{37}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_{37}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ D_{37}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

$$D_{38}^j = \text{Gen}((1, 1, 1, 1, 2), D_1^a). \quad (2.72)$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{38}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{38}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{38}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.73}$$

$$DD_{39}^a = Gen((1, 2, 3, 3, 3), DD_7^a). \tag{2.74}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{39}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{39}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{39}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.75}$$

$$DD_{40}^b = Gen((1, 2, 3, 3, 3), DD_8^b). \tag{2.76}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{40}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{40}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{40}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.77}$$

$$DD_{41}^c = \text{Gen}((1, 2, 3, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.78}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{41}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{41}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{41}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.79}$$

$$DD_{42}^c = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 3), DD_7^a). \tag{2.80}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{42}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{42}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{42}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.81}$$

$$DD_{43}^e = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 3), DD_8^b). \tag{2.82}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{43}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{43}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{43}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.83}$$

$$DD_{44}^f = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.84}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{44}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{44}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{44}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.85}$$

$$DD_{45}^f = \text{Gen}((1, 1, 1, 2, 3), DD_7^a). \tag{2.86}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{45}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{45}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{45}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.87}$$

$$DD_{46}^i = \text{Gen}((1, 1, 1, 2, 3), DD_8^b). \tag{2.88}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{46}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{46}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{46}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.89}$$

$$DD_{47}^j = \text{Gen}((1, 1, 1, 2, 3), DD_9^c). \tag{2.90}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{47}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{47}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{47}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.91}$$

$$DDD_{48}^b = \text{Gen}((1, 2, 3, 4, 4), DD_{28}^b). \tag{2.92}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{48}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{48}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{48}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.93}$$

$$DDD_{49}^c = Gen((1, 2, 3, 4, 4), DD_{29}^c). \tag{2.94}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{49}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{49}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{49}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.95}$$

$$DDD_{50}^d = Gen((1, 2, 3, 4, 4), DD_{30}^d). \tag{2.96}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{50}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{50}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{50}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.97}$$

$$DDD_{51}^e = \text{Gen}((1, 2, 3, 4, 4), DD_{31}^e). \tag{2.98}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{51}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{51}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{51}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.99}$$

$$DDD_{52}^e = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 4), DD_{28}^b). \tag{2.100}$$



$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{52}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{52}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{52}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.101}$$

$$DDD_{53}^f = Gen((1, 1, 2, 3, 4), DD_{29}^c). \tag{2.102}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{53}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{53}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{53}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.103}$$

$$DDD_{54}^h = Gen((1, 1, 2, 3, 4), DD_{30}^d). \tag{2.104}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{54}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{54}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{54}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.105}$$

$$DDD_{55}^i = Gen((1, 1, 2, 3, 4), DD_{31}^e). \tag{2.106}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{55}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{55}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{55}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.107}$$

$$Res(Conf) = R_{56}^a, R_{57}^b, R_{58}^c, R_{59}^d, R_{60}^e, R_{61}^f, R_{62}^g, R_{63}^h, R_{64}^i, R_{65}^j. \tag{2.108}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{56}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{56}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{56}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.109}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{57}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{57}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{57}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.110}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{58}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{58}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{58}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.111}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{59}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{59}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{59}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.112}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{60}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{60}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{60}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.113}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{61}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{61}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{61}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.114}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{62}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{62}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{62}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.115}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{63}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{63}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{63}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.116}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{64}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{64}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{64}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.117}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{65}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{65}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{65}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.118}$$

Тогда:

$$DDDD_{66}^a = R_{56}^a - D_{35}^a - DD_{39}^a. \tag{2.119}$$

$$DDDD_{67}^b = R_{57}^b - DD_{40}^b - DDD_{48}^b. \tag{2.120}$$

$$DDDD_{68}^c = R_{58}^c - D_{36}^c - DD_{41}^c - DD_{42}^c - DDD_{49}^c. \quad (2.121)$$

$$DDDD_{69}^d = R_{59}^d - DDD_{50}^d. \quad (2.122)$$

$$DDDD_{70}^e = R_{60}^e - DD_{43}^e - DDD_{51}^e - DDD_{52}^e. \quad (2.123)$$

$$DDDD_{71}^f = R_{61}^f - D_{37}^f - DD_{44}^f - DD_{45}^f - DDD_{53}^f. \quad (2.124)$$

$$DDDD_{72}^g = R_{62}^g. \quad (2.125)$$

$$DDDD_{73}^h = R_{63}^h - DDD_{54}^h. \quad (2.126)$$

$$DDDD_{74}^i = R_{64}^i - DD_{46}^i - DDD_{55}^i. \quad (2.127)$$

$$DDDD_{75}^j = R_{65}^j - D_{38}^j - DD_{47}^j. \quad (2.128)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}DDD_{66}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}DDD_{66}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDD_{66}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.129)$$



$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{67}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{67}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{67}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.130}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{68}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{68}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{68}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.131}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D D_{69}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D D_{69}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D D_{69}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.132}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D D_{70}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D D_{70}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D D_{70}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.133}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{71}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{71}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{71}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.134}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{72}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{72}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{72}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.135}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D D_{73}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D D_{73}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D D_{73}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.136}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D D D_{74}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D D D_{74}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D D D D_{74}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.137}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{75}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{75}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDD_{75}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.138}$$

При свертке к закону взаимодействия  $a$  матрицы, соответствующие законам  $b, e, g, i$  уничтожаются, аннигилируют. Матрицы, соответствующие законам  $c, h, j$  транспонируются.

$$DDDD_{76}^a = DDDD_{68}^{-c} = (DDDD_{68}^c)^T. \tag{2.139}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{76}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{76}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDD_{76}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.140}$$

$$DDDD_{77}^a = DDDD_{73}^{-h} = (DDDD_{73}^h)^T. \quad (2.141)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDDD}_{77}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDDD}_{77}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDD_{77}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.142)$$

$$DDDD_{78}^a = DDDD_{75}^{-j} = (DDDD_{75}^j)^T. \quad (2.143)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDDD}_{78}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDDD}_{78}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDD_{78}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.144)$$

Матрицы, соответствующие закону  $d, f$  берутся без изменений. Матрицы, соответствующие законам  $a, b, c, f, i, j$  в результате равны нулевой.

Искомое взаимодействие:

$$DDDD_{79}^a = DDDD_{69}^a + DDDD_{77}^a. \quad (2.145)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}DDD_{79}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}DDD_{79}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDD_{79}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.146)$$

### 2.1.5 КПСД DDDDD

Конфигурация:

$$Conf = \langle 1, 2, 3, 4, 5, 6 \rangle, \quad (2.147)$$

использующая набор представлений  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ . Матрицы взаимодействия — результат действия функции:

$$D_{80}^a = Gen((1, 2, 2, 2, 2, 2), D_1^a). \quad (2.148)$$

$$D_{81}^c = Gen((1, 1, 2, 2, 2, 2), D_1^a). \quad (2.149)$$

$$D_{82}^f = Gen((1, 1, 1, 2, 2, 2), D_1^a). \quad (2.150)$$

$$D_{83}^j = Gen((1, 1, 1, 1, 2, 2), D_1^a). \quad (2.151)$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{80}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{80}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{80}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.152}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{81}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{81}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{81}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.153}$$



$$\begin{aligned}
\dot{D}_{82}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{82}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{82}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.154}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{83}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{83}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{83}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.155}$$

$$D_{84}^o = Gen((1, 1, 1, 1, 1, 2), D_1^a). \tag{2.156}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}_{84}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}_{84}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
D_{84}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.157}$$

$$DD_{85}^a = Gen((1, 2, 3, 3, 3, 3), DD_7^a). \tag{2.158}$$

$$DD_{86}^b = Gen((1, 2, 3, 3, 3, 3), DD_8^b). \tag{2.159}$$

$$DD_{87}^c = Gen((1, 2, 3, 3, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.160}$$

$$DD_{88}^c = Gen((1, 1, 2, 3, 3, 3), DD_7^a). \tag{2.161}$$

$$DD_{89}^e = Gen((1, 1, 2, 3, 3, 3), DD_8^b). \tag{2.162}$$

$$DD_{90}^f = Gen((1, 1, 2, 3, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.163}$$

$$DD_{91}^f = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 3), DD_7^a). \tag{2.164}$$

$$DD_{92}^i = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 3), DD_8^b). \tag{2.165}$$

$$DD_{93}^j = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 3), DD_9^c). \tag{2.166}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{85}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{85}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{85}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.167}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{86}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{86}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{86}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.168}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{87}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{87}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{87}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.169}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{88}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{88}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{88}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.170}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{89}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{89}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{89}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.171}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{90}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{90}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{90}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.172}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{91}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{91}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{91}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.173}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{92}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{92}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{92}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.174}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{93}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{93}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{93}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.175}$$

$$DD_{94}^j = \text{Gen}((1, 1, 1, 1, 2, 3), DD_7^a). \tag{2.176}$$

$$DD_{95}^n = \text{Gen}((1, 1, 1, 1, 2, 3), DD_8^b). \tag{2.177}$$

$$DD_{96}^o = \text{Gen}((1, 1, 1, 1, 2, 3), DD_9^c). \tag{2.178}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{94}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{94}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{94}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.179}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}D_{95}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}D_{95}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{95}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.180}$$



$$\begin{aligned}
\dot{DD}_{96}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DD}_{96}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DD_{96}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.181}$$

$$DDD_{97}^b = Gen((1, 2, 3, 4, 4, 4), DD_{28}^b). \tag{2.182}$$

$$DDD_{98}^c = Gen((1, 2, 3, 4, 4, 4), DD_{29}^c). \tag{2.183}$$

$$DDD_{99}^d = Gen((1, 2, 3, 4, 4, 4), DD_{30}^d). \tag{2.184}$$

$$DDD_{100}^e = Gen((1, 2, 3, 4, 4, 4), DD_{31}^e). \tag{2.185}$$

$$DDD_{101}^e = Gen((1, 1, 2, 3, 4, 4), DD_{28}^b). \tag{2.186}$$

$$DDD_{102}^f = Gen((1, 1, 2, 3, 4, 4), DD_{29}^c). \tag{2.187}$$

$$DDD_{103}^h = Gen((1, 1, 2, 3, 4, 4), DD_{30}^d). \tag{2.188}$$

$$DDD_{104}^i = Gen((1, 1, 2, 3, 4, 4), DD_{31}^e). \tag{2.189}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{97}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{97}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{97}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.190}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{98}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{98}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{98}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.191}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{99}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{99}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{99}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.192}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{100}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{100}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{100}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.193}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{101}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{101}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{101}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.194}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{102}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{102}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{102}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.195}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{103}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{103}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{103}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.196}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{104}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{104}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{104}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.197}$$

$$DDD_{105}^i = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 4), DD_{28}^b). \quad (2.198)$$

$$DDD_{106}^j = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 4), DD_{29}^c). \quad (2.199)$$

$$DDD_{107}^m = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 4), DD_{30}^d). \quad (2.200)$$

$$DDD_{108}^n = Gen((1, 1, 1, 2, 3, 4), DD_{31}^e). \quad (2.201)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDD}_{105}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDD}_{105}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDD_{105}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.202)$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DD_{106}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DD_{106}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{106}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.203}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DD_{107}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DD_{107}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{107}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.204}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDD}_{108}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDD}_{108}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{108}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.205}$$

$$DDDD_{109}^d = Gen((1, 2, 3, 4, 5, 5), DDDD_{69}^d). \tag{2.206}$$

$$DDDD_{110}^e = Gen((1, 2, 3, 4, 5, 5), DDDD_{70}^e). \tag{2.207}$$

$$DDDD_{111}^g = Gen((1, 2, 3, 4, 5, 5), DDDD_{72}^g). \tag{2.208}$$

$$DDDD_{112}^h = Gen((1, 2, 3, 4, 5, 5), DDDD_{73}^h). \tag{2.209}$$



$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{109}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{109}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{109}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.210}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{110}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{110}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{110}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.211}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{111}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{111}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{111}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.212}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{112}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{112}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{112}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.213}$$

$$DDDD_{113}^h = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 4, 5), DDDD_{69}^d). \quad (2.214)$$

$$DDDD_{114}^i = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 4, 5), DDDD_{70}^e). \quad (2.215)$$

$$DDDD_{115}^l = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 4, 5), DDDD_{72}^g). \quad (2.216)$$

$$DDDD_{116}^m = \text{Gen}((1, 1, 2, 3, 4, 5), DDDD_{73}^h). \quad (2.217)$$

$$\begin{aligned} \dot{D}DDD_{113}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}DDD_{113}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDD_{113}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.218)$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{114}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{114}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{114}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.219}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{115}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{115}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{115}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.220}$$

$$\begin{aligned}
\dot{D}DDD_{116}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{D}DDD_{116}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDD_{116}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.221}$$

$$\begin{aligned}
Res(Conf) &= R_{117}^a, R_{118}^b, R_{119}^c, R_{120}^d, R_{121}^e, R_{122}^f, \\
&R_{123}^g, R_{124}^h, R_{125}^i, R_{126}^j, R_{127}^k, R_{128}^l, R_{129}^m, R_{130}^n, R_{131}^o.
\end{aligned} \tag{2.222}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{117}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{117}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{117}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.223}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{118}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{118}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{118}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.224}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{R}_{119}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 \ddot{R}_{119}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 R_{119}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.225}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{R}_{120}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 \ddot{R}_{120}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 R_{120}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.226}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{121}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{121}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{121}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.227}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{122}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{122}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{122}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.228}$$



$$\begin{aligned}
\dot{R}_{123}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{123}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{123}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.229}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{124}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{124}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{124}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.230}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{125}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{125}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{125}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.231}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{126}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{126}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{126}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.232}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{127}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{127}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{127}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.233}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{128}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{128}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{128}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.234}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{129}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{129}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{129}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.235}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{130}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{130}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{130}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.236}$$

$$\begin{aligned}
\dot{R}_{131}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{R}_{131}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
R_{131}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.237}$$

Тогда:

$$DDDDD_{132}^a = R_{117}^a - D_{80}^a - DD_{85}^a. \tag{2.238}$$

$$DDDDD_{133}^b = R_{118}^b - DD_{86}^b - DDD_{97}^b. \tag{2.239}$$

$$DDDDD_{134}^c = R_{119}^c - D_{81}^c - DD_{87}^c - DD_{88}^c - DDD_{98}^c. \tag{2.240}$$

$$DDDDD_{135}^d = R_{120}^d - DDD_{99}^d - DDDD_{109}^d. \tag{2.241}$$

$$DDDDD_{136}^e = R_{121}^e - DD_{89}^e - DDD_{100}^e - DDD_{101}^e - DDDD_{110}^e. \tag{2.242}$$

$$DDDDD_{137}^f = R_{122}^f - D_{82}^f - DD_{90}^f - DD_{91}^f - DDD_{102}^f. \tag{2.243}$$

$$DDDDD_{138}^g = R_{123}^g - DDDD_{111}^g. \tag{2.244}$$

$$DDDDD_{139}^h = R_{124}^h - DDD_{103}^h - DDDD_{112}^h - DDDD_{113}^h. \quad (2.245)$$

$$DDDDD_{140}^i = R_{125}^i - DD_{92}^i - DDD_{104}^i - DDD_{105}^i - DDDD_{114}^i. \quad (2.246)$$

$$DDDDD_{141}^j = R_{126}^j - D_{83}^j - DD_{93}^j - DD_{94}^j - DDD_{106}^j. \quad (2.247)$$

$$DDDDD_{142}^k = R_{127}^k. \quad (2.248)$$

$$DDDDD_{143}^l = R_{128}^l - DDDD_{115}^l. \quad (2.249)$$

$$DDDDD_{144}^m = R_{129}^m - DDD_{107}^m - DDDD_{116}^m. \quad (2.250)$$

$$DDDDD_{145}^n = R_{130}^n - DD_{95}^n - DDD_{108}^n. \quad (2.251)$$

$$DDDDD_{146}^o = R_{131}^o - D_{84}^o - DD_{96}^o. \quad (2.252)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDDDD}_{132}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDDDD}_{132}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDDD_{132}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.253)$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{133}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{133}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{133}^b &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.254}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{134}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{134}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{134}^c &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.255}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{135}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{135}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{135}^d &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.256}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{136}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{136}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{136}^e &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.257}$$



$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{137}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{137}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{137}^f &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.258}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{138}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{138}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{138}^g &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.259}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{139}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{139}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{139}^h &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.260}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{140}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{140}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{140}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.261}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{141}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{141}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{141}^j &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.262}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{142}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{142}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{142}^k &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.263}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{143}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{143}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{143}^l &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.264}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{144}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{144}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{144}^m &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.265}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{145}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{145}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{145}^n &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.266}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{146}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{146}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{146}^o &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.267}$$

При свертке к закону взаимодействия  $a$  матрицы, соответствующие законам  $b, e, g, i, l, n$  уничтожаются, аннигилируют. Матрицы, соответствующие законам  $c, h, j$  транспонируются.

$$DDDDD_{147}^a = DDDDD_{134}^{-c} = (DDDDD_{134}^c)^T. \quad (2.268)$$

$$DDDDD_{148}^a = DDDDD_{139}^{-h} = (DDDDD_{139}^h)^T. \quad (2.269)$$

$$DDDDD_{149}^a = DDDDD_{141}^{-j} = (DDDDD_{141}^j)^T. \quad (2.270)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDDDD}_{147}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDDDD}_{147}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDDD_{147}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.271)$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{148}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{148}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{148}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.272}$$

$$\begin{aligned}
\dot{DDDDD}_{149}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
\ddot{DDDDD}_{149}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
DDDDD_{149}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{2.273}$$

Матрицы, соответствующие закону  $d, f, k, m, o$  берутся без изменений. Матрицы, соответствующие законам  $a, b, c, d, e, f, i, j, m, n, o$  в результате равны нулевой.

Искомое взаимодействие:

$$DDDDD_{150}^a = DDDDD_{142}^a + DDDDD_{148}^a. \quad (2.274)$$

$$\begin{aligned} \dot{DDDDD}_{150}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{DDDDD}_{150}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ DDDDD_{150}^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.275)$$

### 2.1.6 Упорядочение законов взаимодействия

Использование приема, когда число представлений равно числу зон, по видимому является универсальным. На входе в Алгоритм разложения окончательно имеем бесконечное число представлений нашей структуры. В этом случае для конфигурации так же необходимо учитывать бесконечное число законов взаимодействия. На выходе, после приведения к конкретной сверхструктуре, число представлений становится малым, для реальных сверхструктур обычно не более восьми. Как видно из предыдущих примеров важно рассматривать упорядоченный набор законов взаимодействия. Удобно делать это при помощи своеобразного стека, делая при этом перебор ранее пришедших в него представлений с последним. Покажем это в Таблице для случая  $DDDDD$ .



Варианты законов взаимодействия															
$p_1$	1	1	2	1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	4	5
$p_2$	2	3	3	4	4	4	5	5	5	5	6	6	6	6	6
Z	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l	m	n	o

### 2.1.7 Набор КПСД в DDDDD

После свертки взаимодействий большинство матриц либо равны нулевой, либо не учитывается вовсе. Конечная матрица для сверхструктуры  $B_2$  описывает взаимодействие крайних для конфигурации зон в которой значения берутся либо с плюсом, либо с минусом в зависимости от четности числа компонентов. Полученный результат по индукции легко масштабировать на произвольную конфигурацию для выбранной нами сверхструктуры. Как видно из приведенного примера, возможность полного разложения существует. Практической же пользы этот факт, пожалуй, не имеет вследствие затухания вклада слишком сложных компонентов в общую энергию дефекта при окончательном расчете с использованием каких либо потенциальных функций.

Ниже приведем Рисунки всех компонентов  $DDDDD$  после разложения на которых схематично представлены участники взаимодействия в сверхструктуре  $B_2$ .

## 2.2 Деформация как комплекс дефектов

Существует неразрывная связь между свойствами материала и его структурой. Влияние внутреннего строения на анизотропию некоторых параметров позволяет предположить такую картину для идеального полностью кристаллического полиэтилена исходя из не кубической симметрии элементарной ячейки этого материала,. Изучим, в частности, некоторые деформационные параметры полимера. Логично использовать для этого выкладки из предыдущей Главы, считая за представление часть кристалла с малым вертикальным сдвигом относительно другой его части.

### 2.2.1 Теоритическое обоснование

Как было показано в первом Томе, при небольших деформациях графиком зависимости энергии дефекта от величины сдвига является положительная ветвь параболы. В следствии этого вторая производная энергии дефекта будет константой. Положим, что энергия дефекта совпадает

с энергией деформации. Ниже приведем *общую теорию упругой деформации* [2].

Если процесс деформации протекает медленно, то он является термодинамически обратимым и удельное изменение внутренней энергии, то есть отношение энергии к объему в котором она изменяется, можно считать суммой изменения энергии деформации и теплоты, которое передано телу:

$$dU = dW + dQ. \quad (2.276)$$

Результирующее изменения энергии тела  $dW$  при деформации можно записать в виде:

$$dW = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}, \quad (2.277)$$

где под знаком двойной сумма стоит соответствующее произведение компоненты тензора напряжений и деформации. Так как процесс обратим (т. е. процесс может протекать в обратном направлении и исходное состояние системы будет достигаться без каких-либо остаточных изменений) для количества теплоты можно записать:

$$dQ = TdS. \quad (2.278)$$

Тогда:

$$dU = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + TdS. \quad (2.279)$$

Свободная энергия тела определяется из соотношения:

$$F = U - TS. \quad (2.280)$$

Тогда удельная свободная энергия:

$$dF = dU - TdS - SdT = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} - SdT. \quad (2.281)$$

При изотермическом протекании процесса деформации изменение температуры  $dT = 0$  и для единичного объема справедливо равенство:

$$dF = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}. \quad (2.282)$$

Это значит, что механическое напряжение, возникающее в деформированном твердом теле, можно определить из частных производных свободной энергии по деформации при постоянной температуре:

$$\sigma_{ij} = \left( \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_T. \quad (2.283)$$

Дважды дифференцируя по деформации получим значение компоненты тензора модулей упругости:

$$C_{iklm} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{lm}} \left( \frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ik}} \right)_T = \frac{\partial^2 F}{\partial \varepsilon_{lm} \partial \varepsilon_{ij}}. \quad (2.284)$$

Имея функциональную зависимость удельной энергии от деформации можно построить графики для первой и второй производной, что соответствует напряжению и модулю сдвига. Дефект упаковки, который появляется в результате сдвига частей кристалла при деформации является планарным. Это означает что объем в котором происходит деформация равен нулю. Применительно к вычислению компоненты тензора модуля упругости в котором фигурирует объем моделируются несколько дефектов упаковки подряд, то есть рассматривается комплекс дефектов упаковки.

### 2.2.2 Энергия КПСД от сдвига

Произведем моделирование планарного дефекта в блоке полностью кристаллического полиэтилена[12]. Рассматривая полимер как кристалл можно применить к нему аппарат кристаллогеометрического анализа дефектов в металлах и сплавах. Сделаем это исходя из того, что в кристалле полиэтилена присутствуют решетка, элементарная ячейка, плоскости из групп атомов двух сортов — углерода и водорода в пропорции 1 к 2. Потенциальную энергию дефекта отыщем сравнив парные связи между частями кристалла, разделенного плоскостью дефекта и частями кристалла без дефекта. На практике используется величина потенциальной энергии, отнесенная к единичной площадке планарного дефекта. Выбор планарных дефектов в качестве объекта исследования обусловлен простотой их реализации в модельном кристалле. Сформировав дефект одним только сдвигом частей кристалла в направлении оси макромолекулы мы добьемся того, что все

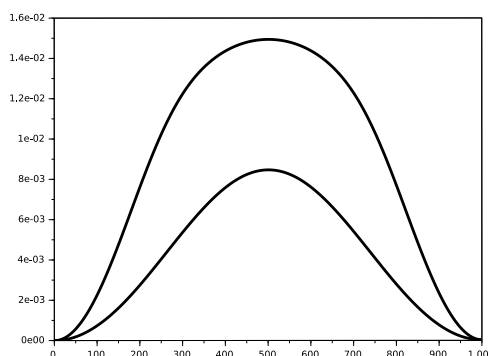


Рис. 2.2: Энергия — функция сдвига

ковалентные связи при этом останутся прежними, а изменится ван-дер-ваальсово взаимодействие между макромолекулами в зависимости от величины сдвига. Величину изменения взаимодействия и будем считать потенциальной энергией дефекта. При небольших деформациях графиком зависимости энергии дефекта от величины сдвига является положительная ветвь параболы, что позволяет сделать предположений об равенстве энергии планарного дефекта и энергии деформации на этом участке. Предполагалась следующая последовательность действий. За величину максимального сдвига был взят параметр решетки, который разбивался на 1000 частей. Такой подход соответствует допущению о малости изменения деформации и соответствующего изменения энергии дефекта. На каждой итерации части кристалла сдвигались относительно друг друга и производился расчет энергии дефекта для соответствующего сдвига. Получалась функциональная зависимость энергии дефекта от величины сдвига.

### 2.2.3 Первая производная

Первые функциональные производные от удельных энергий дают механические напряжения, как функции деформации в кристалле. Истинные приращения функции и аргумента заменяются их дискретными аналогами из итерационного процесса. Поясним это положение.

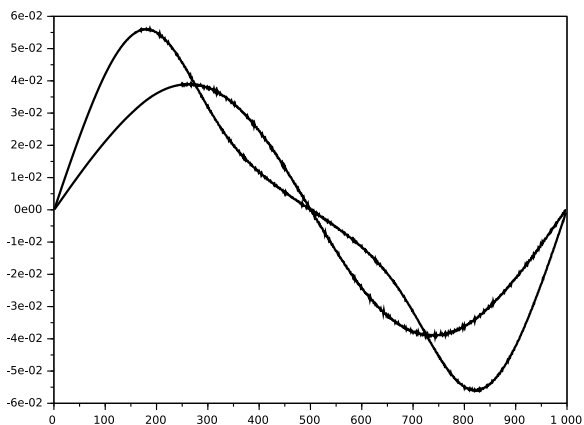


Рис. 2.3: Первая производная

Вспомним о том, что функция как таковая может быть определена не единственным способом.

Во-первых ее можно задавать набором значений функции, соответствующих набору аргументов. Во-вторых функция однозначно определяется графиком. В третьих формулой, выражающей зависимость величины функции от соответствующих значений аргумента явно, в символьном виде.

Выбор в пользу первого способа дает возможность использовать все

преимущества машинного эксперимента. Можно варьировать шаг приращения аргумента, добиваясь при этом приемлемой гладкости изменения функции.

### 2.2.4 Вторая производная

При малых деформациях напряжение увеличивается линейно, соответственно на этом участке кривой выполняется обобщенный закон Гука. Вторые функциональные производные от удельных энергий по деформации дадут зависимость модулей упругости как функций деформации. Для малых деформаций их график приведен на Рис.(2.4). Как видно из графика их значения при малых деформациях практически постоянны и составляют 0,45 и 0,33  $kcal/(mol \cdot \text{Å}^3)$ . Значения параметров модели брались с учетом того, что взаимодействие Ван-дер-Ваальса удовлетворительно описывается потенциалами Ленарда-Джонса. Именно оно, а не ковалентные связи отвечает за межплоскостное взаимодействие. Использование констант потенциала для нахождения энергии деформации в кристалле полиэтилена рассмотрим позднее.

Как уже говорилось, объем в котором происходит деформация при рассмотрении планарного дефекта равен нулю, тогда как для расчета удельной энергии необходимо наличие объема отличного от нуля. Решить эту проблему удастся смоделировав несколько планарных дефектов подряд, или, другими словами, рассмотрев комплекс планарных дефектов, распределив сдвиг

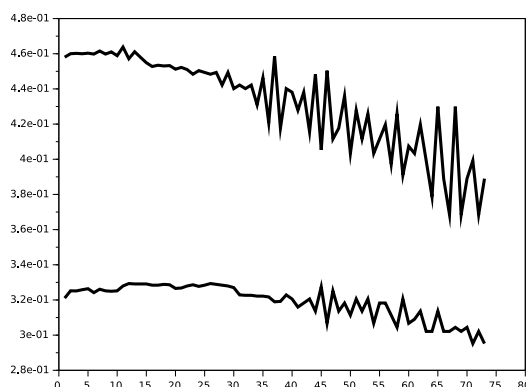


Рис. 2.4: Модули сдвига

равномерно между слоями макромолекул. За свободное от напряжений состояние тела, от которого следует отсчитывать мгновенно обратимые, то есть упругие деформации принимался кристалл без дефекта. Важно отметить следующий момент. Достаточно с точки зрения оценки величины модулей брать в расчет взаимодействие планарных дефектов типа  $DD$ . Варианты типа  $DDD$ ,  $DDDD$  и так далее приведут лишь к небольшому уточнению величин модулей. То, что среднее арифметическое двух найденных значений в пределах погрешности совпадает в величиной мо-

дуля упругости полиэтилена скорее совпадение. Этот параметр зависит от температуры, а в нашей модели это не учитывалось. Важен, скорее порядок величины. Это указывает на правомерность использования подхода *MOSATE* в изучении деформационных характеристик некоторых кристаллов. Не говоря о количественной стороне, качественную картину поведения кристаллов такой подход описывает верно.

### 2.2.5 Потенциал для оценки энергии

Значения модельного потенциала Ленарда-Джонса

$$\phi_{PQ}(r_{ij}) = 4\epsilon_{PQ} \cdot \left[ \left( \frac{\sigma_{PQ}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{PQ}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \cdot W(r_{ij})$$

взяты в готовом виде из [12].

Параметры потенциала		
Элемент $PQ$	$\epsilon_{PQ}$ в $kcal/mol$	$\sigma_{PQ}$ в $\text{Å}$
С-С	0.055	3.875
Н-Н	0.022	2.352
С-Н	0.0347851	3.1135

В том же источнике рассматривается и нами используется функция сглаживания с параметрами  $R_{on} = 9\text{Å}$ ;  $R_{off} = 10.5\text{Å}$ :

$$W(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & \text{если } r_{ij} \leq R_{on}; \\ \frac{(R_{off}^2 - r_{ij}^2)^2 \cdot (R_{off}^2 - 3R_{on}^2 + 2r_{ij}^2)}{(R_{off}^2 - R_{on}^2)^3}, & \text{если } R_{on} < r_{ij} < R_{off}; \\ 0, & \text{если } r_{ij} \geq R_{off}. \end{cases}$$

### 2.2.6 Энергия КПСД в полярных координатах

Анизотропия компонентов тензора модулей упругости является следствием анизотропии соответствующих энергий сдвига планарного дефекта. Вид графиков на Рис.(2.2) указывает на то, что для сдвига частей кристалла полиэтилена на лицо потенциальный барьер. Зависимость величины энергии барьера для фиксированного сдвига от угла между направлением нормали к плоскости сдвига и вектором  $(1; 0; 0)$  является сложной. Являясь гладкой функцией она характеризуется графиком, приведенном ниже. Минимум соответствует семейству направлений  $(1; 0; 0)$ , локальный минимум соответствует семейству  $(1; 1; 0)$ . Максимум соответствует семейству направлений  $(0; 1; 0)$ .

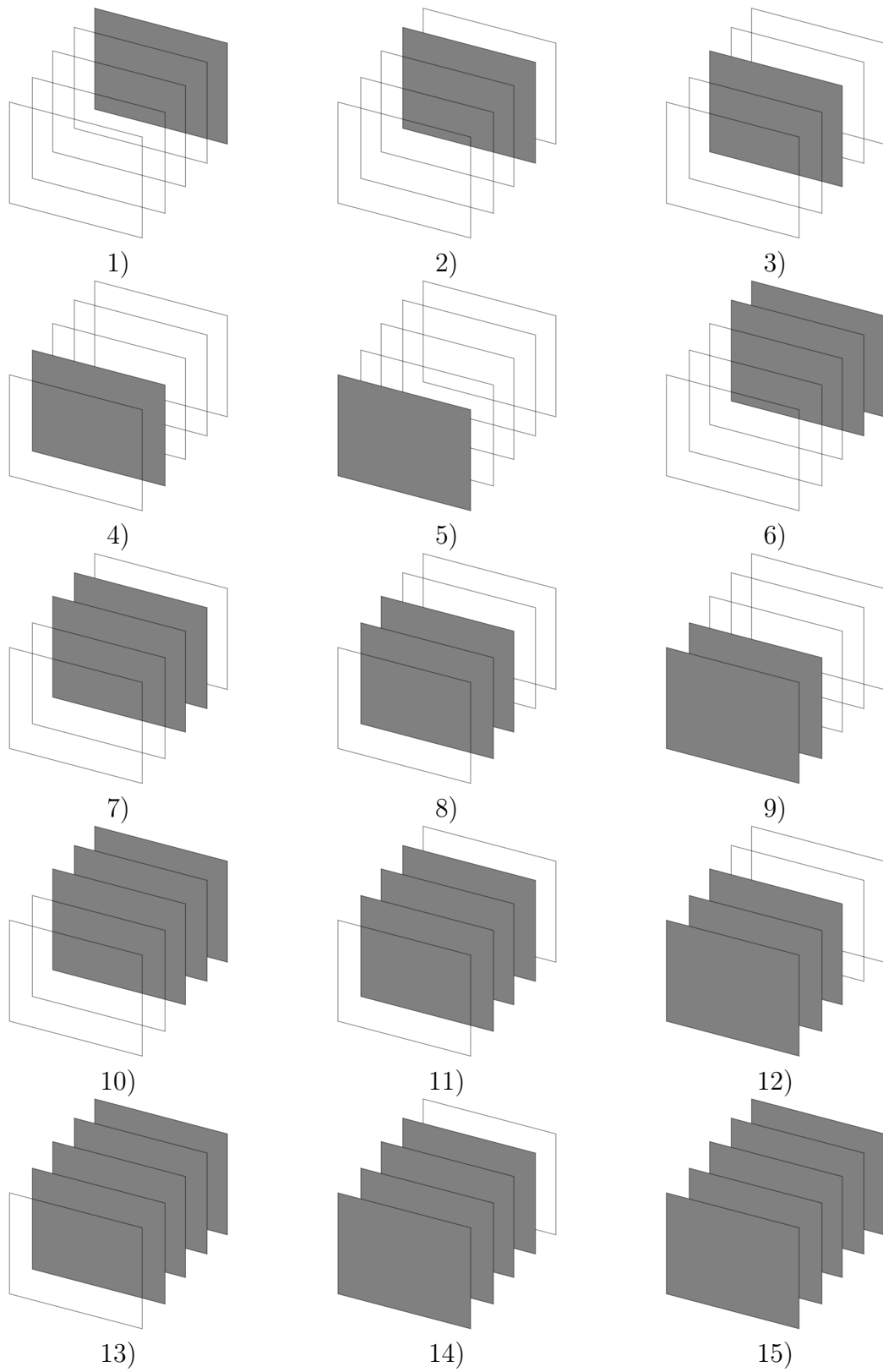
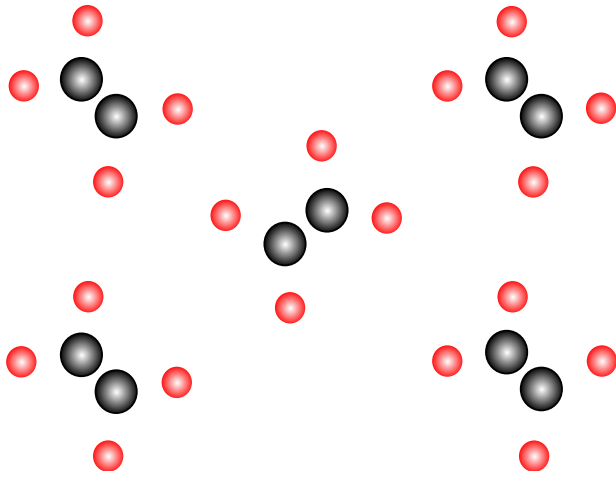
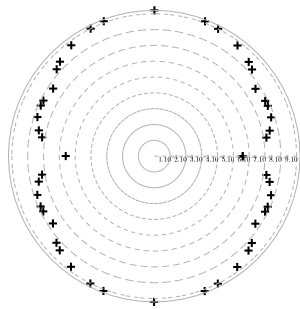


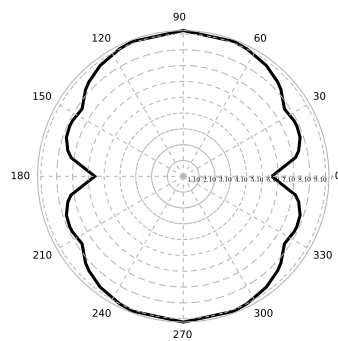
Рис. 2.1: Набор КПСД DDDDD



а) Структура полиэтилена в плане



б) Энергия барьера



с) Аппроксимация линией



## Глава 3

# Трансформация КПСД

При расчете энергии сложных дефектов в виде тел, топологически эквивалентных сфере мы сравнивали энергии частей одного дефекта по отношению друг к другу. Изучая деформацию брали во внимание около тысячи энергетических состояний сложного дефекта и получали функции, необходимые для дискретного дифференцирования. Остается случай, в некотором роде промежуточный, когда рассматриваются только два временных состояния кристалла — это две конфигурации в начале и конце преобразования дефекта.

Переходя к поиску закономерностей трансформации кристаллов отметим, что на ряду с некоторой универсальностью подхода взаимодействующих зон, у него есть и ограничения. Характерно здесь то, что с его помощью можно проводить лишь достоверный качественный анализ результатов расчетов. В категориях больше - меньше уже можно предполагать наличие некоторых свойств и даже прогнозировать поведение материалов. Часто такой оценки бывает достаточно. Логично использовать подход для предварительной оценки чего то.

К таким случаям относятся динамические процессы, довольно сильно растянутые во времени. Существует возможность опустить промежуточный набор состояний кристалла и сравнить только то, что было в начале и конце такого процесса. Такой подход существенно экономичней с точки зрения затрат машинного времени для его расчета. К тому же он позволяет без привлечения такой величины, как время судить о выгодности того или иного варианта развития событий.

Каким образом возможно предсказывать наиболее вероятный вариант трансформации в кристалле? Критерий соответствия минимуму энергии конечной конфигурации позволит судить об этом не выходя за рамки метода взаимодействующих зон.

### 3.1 Эволюция КПСД

Допустим, что кристалл эволюционирует, то есть трансформируется во времени. Выделим из всего возможного ряда таких примеров поведения планарных сверхструктурных дефектов вариант, который удастся охарактеризовать с помощью графиков, отображающих изменение энергии кристалла в зависимости от направления такого преобразования, расщепления. Для начала попытаемся описать задачу расщепления сплава в категориях и понятиях сложных дефектов.

#### 3.1.1 Постановка задачи

Изобразим графически на Рис.(3.1) элементарный путь превращения модельного кристалла с дефектом из начальной конфигурации в конечную.

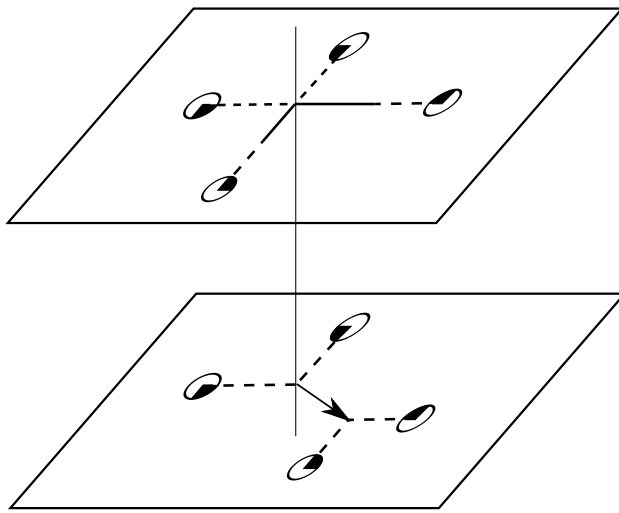


Рис. 3.1: Схема трансформации

В рамках *MOCATE* имеются два отличающихся между собой инструментария для расчета энергии дефектов. Первый прием позволяет решить задачу непосредственно из результирующих матриц для каждого закона взаимодействия. Таковые получаются автоматически из определяющих конфигураций начального и конечного этапов эволюции КПСД.

Второй прием рассматривает компоненты комплексов планарных сверхструктурных дефектов. Там результирующие матрицы так же используются на промежуточных этапах для выделения каждого из компонентов дефекта. Там результирующие матрицы так же используются на промежуточных этапах для выделения каждого из компонентов дефекта. Калибруя, то есть совмещая и подгоняя размеры дефектов для того, чтобы можно было отбросить части компонентов, которые имеют бесконечные, но равные по величине энергии до и после расщепления, мы сможем сделать окончательный вывод о вероятности процесса трансформации. На Рис.(3.1) одинаковой штриховкой выделены части компонентов с равной энергией. Сплошной линией обозначены части дефектов, имеющие разную энергию. Стрелкой показано направление расщепления. Ось проходит через ядро, точку отсчета трансформации дефекта.

### 3.1.2 Квасисила от азимута

В результате мы имеем возможность найти разность энергии начальной и конечной конфигураций. Вот только сравнивать эти значения для различных направлений расщепления будет неверным. Дискретность кристаллической решетки подразумевает таковую и для частей, формирующих дефект. Не верно, рассматривая кристалл, выбирать любое направления. Правильным будет делать это сообразно, кратно параметру решетки. Выходом из этого затруднения будет отнесение найденного значения изменения энергии к длине вектора расщепления. В этом случае полученную величину можно интерпретировать как отношение работы расщепления к перемещению, на которой эта работа затрачивалось. Такая величина соответствует силе, правильнее говоря **квасисиле** так как точками приложения являются не конкретные атомы или объекты в кристалле, а сущности иного рода, фрагменты пересечения плоскостей, формирующих дефекты. В нашем случае им соответствуют линейные компоненты дефектов.

$$F = \frac{\Delta W}{l} = \frac{A}{l}. \quad (3.1)$$

### 3.1.3 Потенциал для оценки энергии

Энергия произвольного компонента определяется числом и типом изменившихся связей в зонах, сформированных плоскостями сложного дефекта. По сути подсчитываются пары атом-атом, каждому из которых удобно ставить в соответствие степень двойки. Тогда сумма степеней двоек четко определяет взаимодействующую пару. Такой подход на выходе дает наборы с бесконечным числом членов, ряд значений, которые соответствуют как сорту пары так и длине связи, учитываемой во взаимодействии. Тут никакого разночтения быть не может.

Практически все достоинства подхода, изложенного выше нивелируются, когда мы пытаемся сделать количественную оценку энергии, описываемой комбинациями сортов атомов. Неопределенности начинается, когда мы переводим эти наборы в конкретное значение энергии, скажем в электрон-вольты. Из рассмотренной модели сделать такой шаг проще всего используя потенциальные функции. Их несколько, но для металлов и их сплавов чаще всего используют потенциалы Морзе.

Пусть энергия взаимодействия атомов рассчитывается посредством парного потенциала Морзе

$$\phi_{PQ}(r_{ij}) = D_{PQ}\beta_{PQ}\exp(-\alpha_{PQ}r_{ij})(\beta_{PQ}\exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) - 1)$$

где  $D, \beta$  и  $\alpha$  — параметры потенциала,  $r_{i,j}$  — расстояние между атомами  $i$  и  $j$ . Для нашего сплава  $Pt_3Al$  параметры потенциала взяты из работы [14]:

Параметры Морза			
Элемент $PQ$	$D_{PQ}$ в $eV$	$\beta_{PQ}$	$\alpha_{PQ}$ в $\text{Å}^{-1}$
Al-Al	0.318	27.4979	1.02658
Al-Pt	0.5048	63.124	1.3501
Pt-Pt	0.710	102.89	1.582

наименьшее расстояние между атомами  $2.78 \text{ Å}$ . В этой же работе описана процедура подбора параметров потенциала.

Будем использовать комбинированный потенциал, в котором параметр  $x$  отвечает за максимальное число сфер, учитываемых во взаимодействии:

$$\phi_{PQ}(r_{ij}) = \begin{cases} D_{PQ}\beta_{PQ}\exp(-\alpha_{PQ}r_{ij})(\beta_{PQ}\exp(-\alpha_{PQ}r_{ij}) - 1), & \text{если } x < 14; \\ 0, & \text{если } x \geq 14. \end{cases}$$

Причина такого выбора кроется в том, что данный потенциал на больших расстояниях ведет себя не правильно [15].

Можно показать, что количественная картина взаимодействия при варьировании длины обрезки потенциала меняется полностью. При этом качественная зависимость величин рассчитываемых энергий и, соответственно, сил остается неизменной.

Не будем требовать от подхода *MOSATE* слишком большой общности. Оставим лишь те вопросы, на которые мы можем ответить. А именно — как трансформируется конфигурация в кристалле?

### 3.1.4 Приоритетное направление расщепления

Анализ графиков, полученных нами позволяет судить о ходе того или иного процесса трансформации, исходя из симметрии в расположения атомов конфигурации.

Прослеживается четкая картина не только в совпадении по величине, но и в зеркальности участков графиков, иногда в инверсии значений силы.

Направление, соответствующее углу					
Угол в градусах	X	Y	Угол в градусах	X	Y
7.125	8	1	187.125	-8	-1
14.036	8	2	194.036	-8	-2
20.556	8	3	200.556	-8	-3
26.565	8	4	206.565	-8	-4
32.005	8	5	212.005	-8	-5
36.869	8	6	216.869	-8	-6
41.185	8	7	221.185	-8	-7
48.814	7	8	228.814	-7	-8
53.130	6	8	233.130	-6	-8
57.994	5	8	237.994	-5	-8
63.434	4	8	243.434	-4	-8
69.443	3	8	249.443	-3	-8
75.963	2	8	255.963	-2	-8
82.874	1	8	262.874	-1	-8
97.125	-1	8	277.125	1	-8
104.036	-2	8	284.036	2	-8
110.556	-3	8	290.556	3	-8
116.565	-4	8	296.565	4	-8
122.005	-5	8	302.005	5	-8
126.869	-6	8	306.869	6	-8
131.185	-7	8	311.185	7	-8
138.814	-8	7	318.814	8	-7
143.130	-8	6	323.130	8	-6
147.994	-8	5	327.994	8	-5
153.434	-8	4	333.434	8	-4
159.443	-8	3	339.443	8	-3
165.963	-8	2	345.963	8	-2
172.874	-8	1	352.874	8	-1

Для каждого графика приводятся максимальное и минимальное значения квазисилы от угла наклона вектора расщепления, отсчитываемого от оси абсцисс и выраженного в градусах.

В аннотации к Графикам указан набор с порядком представлений в соответствие с примером. Важно отметить зависимость величин энергий для Графиков от стехиометрии варианта. Следствием этого будет зависимость результатов расчетов от того, какой вариант элементарной ячейки сверхструктуры выбран и под каким номером.

Подробнее остановимся на этом аспекте. Успешность решения какой либо задачи в рамках подхода *МОСАТЕ* напрямую зависит от того,

будем мы использовать упорядочение в рассматриваемых множествах, будь то плоскости, представления, зоны, или законы взаимодействия. Свойство упорядочения — вот то, что позволяет справиться с поставленной задачей.

Теория множеств изобилует различными теоремами на этот счет. Для нас будет достаточно того факта, что само наличие Алгоритма выбора уже относит множество в разряд счетного. Во всех подробностях эти Алгоритмы будут представлены в Томе, посвященном исходному коду программ проекта *MOCATE*. Утилиты *mocate*, *generate*, *promocate* используют это свойство, тем более что в рамках проекта берутся множества конечные, упорядоченные по определению. Упорядочение, в некотором смысле, вообще присуще, свойственно кристаллам, ведь само понятие сверхструктуры как следствие правильного чередования сортов атомов позволяет считать его идеальным, а нарушение такого порядка представляет нам весь спектр дефектов, поддающихся классификации, дальнейшему разложению.

Вернемся к предмету нашего рассмотрения. Направления расщепления — это вектор, лежащий в плоскости  $XOY$  и представляющий квазисилу, отнесенную к параметру решетки с максимальным по модулю значением. Положительное значение указывает направление расщепления КПСД. Отрицательное значение характеризует обратный процесс. Условимся брать в рассмотрение первую попавшуюся нам максимальную по модулю величину при возрастании угла расщепления.

Угол, выраженный в градусах, будем отсчитывать от оси абсцисс квадранта в сторону оси ординат. Часто таких величин несколько — две, четыре или, как для графиков №6 и №10, восемь. Такие величины равноценны и вероятность расщепления или обратного процесса в этом направлении одинакова.

Указать такую пару направлений для каждого графика не составит труда, если использовать вспомогательную таблицу.

Вектор расщепления является радиус-вектором и однозначно задается координатами компонент, изменяемых нами в итерационном процессе. Для первого значения угла это  $(8, 1, 0)$ . В общем виде запись имеет вид  $(X, Y, 0)$ .

### 3.1.5 Варианты расщепления

Вариант 1.

Это 6,10 графики. Представлен набором из единственного квадранта. Дает два варианта значений энергий равных по модулю, но противоположных по знаку. Соответствует веерному расположению, то есть по внешнему, либо по внутреннему радиусу для атома сорта  $A$  относительно центра дефекта до расщепления.

Вариант 2.

Это 4,12,13,21 графики.

Каждый вариант представлен набором представителей из пары квадрантов. Дает пары вариантов значений энергий равных по модулю, но противоположных по знаку.

Вариант 3.

Это 15,19 графики. Вариант так же представлен набором представителей из пары квадрантов. Дает два варианта значений энергий равных по модулю, но противоположных по знаку.

Вариант 4.

Это 1,5,8,9,16,17,20,24 графики. Представлен набором представителей четверки квадрантов. Дает соответствующие варианты значений энергий равных по модулю, но противоположных по знаку. Атомы сорта  $A$  относительно центра дефекта до расщепления лишь частично упорядочены.

Вариант 5.

Это 2,3,7,11,14,18,22,23 графики. Представлен набором представителей восьмерки квадрантов. Так же дает соответствующие варианты значений энергий равных по модулю, но противоположных по знаку. Атомы сорта  $A$  относительно центра дефекта до расщепления разупорядочены.

Отметим еще симметрию для инверсии значений некоторых графиков. Символ  $P$  означает зеркальное отражение величин абсцисс в плоскости ординат.

### 3.1.6 Потенциальный барьер

Подойдем, наконец к главному результату графического представления процесса расщепления. Налицо нестабильность конфигураций, определяющих дефект. В большей или меньшей степени ей подвержены все конфигурации. Все кроме десятой. Для нее в любом случае возникает сила, противодействующая расщеплению. Этому случаю соответствует потенциальный барьер. Напротив, конфигурация под номером шесть нестабильна в принципе. Малейшая флуктуация приведет к распаду дефекта

в виде пересечения двух плоскостей с последующим расщеплением. Это-  
му случаю соответствует потенциальная яма.

Если проводить аналогию с механическим равновесием, то наши кон-  
фигурации соответствуют какому либо ее виду. Десятая — случаю устой-  
чивого, шестая, напротив, не устойчивого равновесия.

Хотелось бы отметить конфигурации, определяющие графики под  
номераами 4, 12, 13, 21. Для них можно считать равновесие безразличным.  
Такой вывод можно сделать вследствие малого монотонного отклонения  
величины силы от нулевого значения на графиках.

Совокупности полуквадрантов с инверсией			
№	Вариант	Min	Max
1	1,P5,5,P1,17,-P16,-16,P17	4	2
2	2,P3,-3,-P2,-18,P14,-14,P18	1	1
3	3,P2,18,-P14,14,-P18,-2,-P3	1	1
4	4,P4,-4,-P4,4,P4,-4,-P4	4	4
5	5,P1,17,-P16,-16,P17,1,P5	4	2
6	6,P6,6,P6,6,P6,6,P6	16	8
7	-2,-P3,3,P2,18,-P14,14,-P18	1	1
8	-1,-P5,-5,-P1,-17,P16,16,-P17	2	4
9	-5,-P1,-17,P16,16,-P17,-1,-P5	2	4
10	-6,-P6,-6,-P6,-6,-P6,-6,-P6	8	16
11	-3,-P2,-18,P14,-14,P18,2,P3	1	1
12	-4,-P4,4,P4,-4,-P4,4,P4	4	4
13	13,-P13,13,-P13,13,-P13,13,-P13	4	4
14	14,-P18,-2,-P3,3,P2,18,-P14	1	1
15	15,-P15,-15,P15,15,-P15,15,P15	8	8
16	16,-P17,-1,-P5,-5,-P1,-17,P16	2	4
17	17,-P16,-16,P17,1,P5,5,P1	4	2
18	18,-P14,14,-P18,-2,-P3,3,P2	1	1
19	-15,P15,15,-P15,-15,P15,15,-P15	8	8
20	-16,P17,1,P5,5,P1,17,-P16	4	2
21	-13,P13,-13,P13,-13,P13,-13,P13	4	4
22	-14,P18,2,P3,-3,-P2,-18,P14	1	1
23	-18,P14,-14,P18,2,P3,-3,-P2	1	1
24	-17,P16,16,-P17,-1,-P5,-5,-P1	2	4

Интересно следующее примечание. Возможно чисто геометрически  
создать конфигурацию только из устойчивых КПСД. Атомы одного сор-  
та в ней будут расположены вокруг ядер дефектов. Равно возможно со-  
здать полностью нестабильную совокупность таких КПСД. При этом  
идеальный кристалл без дефектов является, по сути, системой в безраз-



личном равновесии, предоставляет нам пример некоего канона, вариант со стабилизированной стехиометрией.

Разделение всех вариантов конфигураций в некоторые группы согласно внутренней симметрии элементарной ячейки является первым результатом решения задачи, которая сводится к расщеплению конфигураций, сформированных парой взаимно перпендикулярных плоскостей. Этот результат, скорее, теоретического характера. Вторым результатом анализа полученных графиков будет теоретическое обоснование существования в сверхструктуре стационарных или противоположно, нестационарных конфигураций. Этот результат скорее прикладного характера. Структуры из одинаковых атомов в одном случае будут существовать долго, а в другом претерпевать изменения практически сразу после своего появления.

## 3.2 Проблема Штейнера и трансформация

Попытка решения задачи расщепления КПСД на первый взгляд оказалось успешной. Получен конкретный результат в виде набора графиков значения энергии, приведенной к длине вектора расщепления. Существование стабильной конфигурации, как и нестабильной возможно в принципе. А какие еще возможные варианты решения существуют? Чтобы ответить на этот вопрос рассмотрим следующее геометрическое приложение, известное как проблема Штейнера.

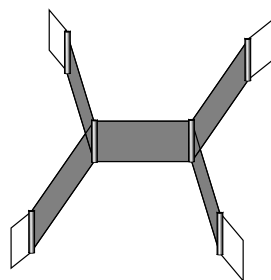
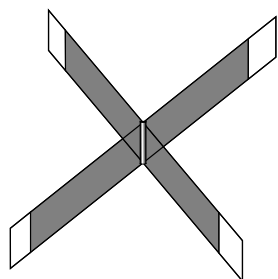


Рис. 3.2: Исходная конфигурация      Рис. 3.3: Конечная конфигурация

Данная задача была сформулирована и решена два столетия тому назад и касалась она отнюдь не кристаллов. Если на плоскости заданы три данные точки, то четвертая, внутренняя, «смотрит» на каждую из них под углом 120 градусов. В таком положении сумма расстояний до

трех точек соответствует минимуму. Проблема Штейнера является утилитарной ко многим областям знаний. Например необходимо построить сеть дорог между четырьмя населенными пунктами с наименьшими затратами, если стоимость, своего рода вес каждого такого направления разный.

Такая формулировка применительно к сверхструктурам позволяет заменить направления планарными дефектами. Тогда появляется целый ряд примеров такого решения, если отыскивать не одну точку внутри данных, а несколько. Частный случай — это две пары точек, формирующие пару плоскостей дефекта в начале, внутри которых необходимо отыскать еще одну пару точек, дающие вариант КПСД в конце процесса. Как следует из Рис.(3.2,3.3) этот случай как раз и поддается расчету, так как планарные дефекты имеют совпадающие бесконечные члены.

Отыскав разность энергий двух КПСД мы получим возможность судить о вероятности такого превращения. В отличии от уже рассмотренных задач расщепления проблема Штейнера в приложении к кристаллам разрешима для любых пересечений плоскостей, если они удовлетворяют требованиям формирования КПСД, о которых еще будет сказано. Число таких решений бесконечно, хотя казалось бы ограничено возможными размерами блока смоделированного кристалла. О том, как это возможно обойти, поговорим позднее, а сейчас приведем первоначальное, тривиальное решение поставленной задачи.

### 3.2.1 Результирующие матрицы

В начале найдем энергии используя лишь результирующие матрицы.

Для сверхструктуры  $L1_2$   $n = 4$ . Множество представлений фиксировано для изложенного далее:

$$\{1, 2, 3, 4\}. \quad (3.2)$$

Здесь номер представления соответствует позиции атома сорта  $A$  в

$$ABBB, BABB, BBAB, BBBA. \quad (3.3)$$

Законы взаимодействия для четырех представлений  $C_4^2 = 6$ :

$$\begin{aligned} a_{lm} &= A_l^1 A_m^2, b_{lm} = A_l^1 A_m^3, c_{lm} = A_l^1 A_m^4, \\ d_{lm} &= A_l^2 A_m^3, e_{lm} = A_l^2 A_m^4, f_{lm} = A_l^3 A_m^4. \end{aligned} \quad (3.4)$$

### 3.2.2 Плоскости

Приведем координаты плоскостей для двух вариантов развития событий.

Случай 1:

$$\begin{aligned}
 \alpha : F(x, y, z) &\equiv 1(x - 24.5) + 0(y - 6.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \beta : F(x, y, z) &\equiv 0(x - 6.5) - 1(y - 26.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \gamma : F(x, y, z) &\equiv 3(x - 24.5) + 1(y - 6.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \delta : F(x, y, z) &\equiv 4(x - 20.5) + 7(y - 18.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \epsilon : F(x, y, z) &\equiv 3(x - 28.5) + 1(y - 34.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \zeta : F(x, y, z) &\equiv 4(x - 42.5) + 7(y - 26.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \eta : F(x, y, z) &\equiv 2(x - 20.5) - 1(y - 18.5) + 0(z - 0) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Случай 2:

$$\begin{aligned}
 \alpha : F(x, y, z) &\equiv 1(x - 24.5) + 0(y - 6.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \beta : F(x, y, z) &\equiv 0(x - 6.5) - 1(y - 26.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \gamma : F(x, y, z) &\equiv 8(x - 24.5) + 1(y - 6.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \delta : F(x, y, z) &\equiv 1(x - 22.5) + 4(y - 22.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \epsilon : F(x, y, z) &\equiv 8(x - 26.5) + 1(y - 30.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \zeta : F(x, y, z) &\equiv 1(x - 42.5) + 4(y - 26.5) + 0(z - 0) = 0. \\
 \eta : F(x, y, z) &\equiv 2(x - 22.5) - 1(y - 22.5) + 0(z - 0) = 0.
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Тогда конфигурации до и после процесса:

$$Conf = \langle 2, 1, 2, 1, 2, 4, 1, 2, 2, 4, 2, 4, 1, 3, 1, 3, 4, 1, 3, 3, 4, 3, 4, 3 \rangle. \tag{3.7}$$

$$Conf = \langle 1, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 4, 4, 1, 1, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 3, 4, 4 \rangle. \tag{3.8}$$

### 3.2.3 Величины энергий

Представляется выгодным с точки зрения затрат машинного времени получить дельта-матрицы для расчета величин энергий. Для этого из матриц после процесса необходимо вычесть матрицы до расщепления. Делалось это неоднократно стандартным способом используя конфигурации, определяющие дефекты до и после процесса расщепления. По этой причине запись этих матриц можно опустить.

Ниже приведем Таблицу энергий, рассчитанных для всех возможных наборов представлений сверхструктуры  $L_{12}$ .

Варианты величин энергий в $eV/\text{Å}$			
№	Представления	Случай 1	Случай 2
1	{1,2,3,4}	$1.2474 \cdot 10^{16}$	$8.8812 \cdot 10^{15}$
2	{1,2,4,3}	$5.1999 \cdot 10^{14}$	$-3.057 \cdot 10^{15}$
3	{1,3,2,4}	$-1.258 \cdot 10^{15}$	$-2.237 \cdot 10^{15}$
4	{1,3,4,2}	$-5.969 \cdot 10^{14}$	$-2.551 \cdot 10^{15}$
5	{1,4,2,3}	$6.9524 \cdot 10^{15}$	$7.3111 \cdot 10^{15}$
6	{1,4,3,2}	$1.9301 \cdot 10^{16}$	$1.8668 \cdot 10^{16}$
7	{2,1,3,4}	$3.6265 \cdot 10^{15}$	$2.9642 \cdot 10^{15}$
8	{2,1,4,3}	$-9.843 \cdot 10^{15}$	$-9.745 \cdot 10^{15}$
9	{2,3,1,4}	$-8.188 \cdot 10^{15}$	$-8.489 \cdot 10^{15}$
10	{2,3,4,1}	$-2.124 \cdot 10^{16}$	$-1.822 \cdot 10^{16}$
11	{2,4,1,3}	$1.7248 \cdot 10^{15}$	$1.9628 \cdot 10^{15}$
12	{2,4,3,1}	$2.1926 \cdot 10^{15}$	$5.0438 \cdot 10^{15}$
13	{3,1,2,4}	$2.4555 \cdot 10^{13}$	$1.4060 \cdot 10^{14}$
14	{3,1,4,2}	$-8.306 \cdot 10^{14}$	$-8.258 \cdot 10^{14}$
15	{3,2,1,4}	$2.0616 \cdot 10^{15}$	$1.7673 \cdot 10^{13}$
16	{3,2,4,1}	$-1.107 \cdot 10^{16}$	$-9.784 \cdot 10^{15}$
17	{3,4,1,2}	$9.1019 \cdot 10^{15}$	$9.8719 \cdot 10^{15}$
18	{3,4,2,1}	$-3.032 \cdot 10^{15}$	$1.2491 \cdot 10^{15}$
19	{4,1,2,3}	$-3.045 \cdot 10^{15}$	$-2.150 \cdot 10^{15}$
20	{4,1,3,2}	$9.4366 \cdot 10^{15}$	$9.4070 \cdot 10^{15}$
21	{4,2,1,3}	$2.0242 \cdot 10^{15}$	$-8.900 \cdot 10^{14}$
22	{4,2,3,1}	$9.4910 \cdot 10^{14}$	$1.4327 \cdot 10^{15}$
23	{4,3,1,2}	$-6.888 \cdot 10^{14}$	$-1.302 \cdot 10^{15}$
24	{4,3,2,1}	$-1.441 \cdot 10^{16}$	$-1.069 \cdot 10^{16}$

Автором намеренно формировались конфигурации с расположением атомов в узлах решетки, не совпадающим с примерами на расщепление, приведенными в первой Главе данной работы. Отсюда становится понятным различие, полная противоположность результатов для шестого и десятого примеров в сравнении с таковыми из Главы о расщеплении с точки зрения стабильности конфигурации. Это было сделано с той целью, чтобы подтвердить, что ни набор представлений, ни набор плоскостей, формирующих дефект сами по себе, а только их совокупность дает значение энергии, так или иначе характеризующее комплекс планарных дефектов.

Результирующие матрицы позволяют представить общую, но не исчерпывающую картину энергетики КПСД. Подробности описания взаи-

модействия возможно представить рассматривая энергию каждого компонента по отдельности.

### 3.2.4 Компоненты

Было бы затратным, с точки зрения изложения, приводить выкладки для всех компонентов, участвующих во взаимодействии в рассматриваемой задаче. Приведем простое перечисление таковых.

В исходном состоянии имеем четыре матрицы для планарных компонентов и один линейный компонент, представленный шестью матрицами для каждого закона взаимодействия.

В конечном состоянии имеем пять матриц для планарных компонентов, четыре линейных компонента с матрицами взаимодействия для каждого, а так же два линейных компонента в центре дефекта с тремя матрицами для каждого из них. Взаимодействие линейных компонентов между собой практически не влияет на общее положение вещей при анализе процесса превращения дефектов — их можно опустить.

Из соответствующих рисунков становится понятным, как энергия тех или иных компонентов влияет на направление, эволюцию конфигураций. Как и ожидалось, львиную долю вклада в окончательную энергию дают планарные компоненты. С ростом размера дефектов эта тенденция только увеличивается.

Ранее упоминалось об ограниченности выбора возможных случаев включаемых в проблему Штейнера из за размеров блока атомов, если для расчета энергии использовать только результирующие матрицы. Вариант с компонентами позволяет обойти это ограничение, ведь матрицы линейных компонентов при увеличении блока не меняются вовсе. Размеры планарных компонентов увеличиваются кратно параметру решетки, что позволяет рассчитать энергию вставок отдельно и суммировать ее в согласно масштаба на выходе из процесса превращения.

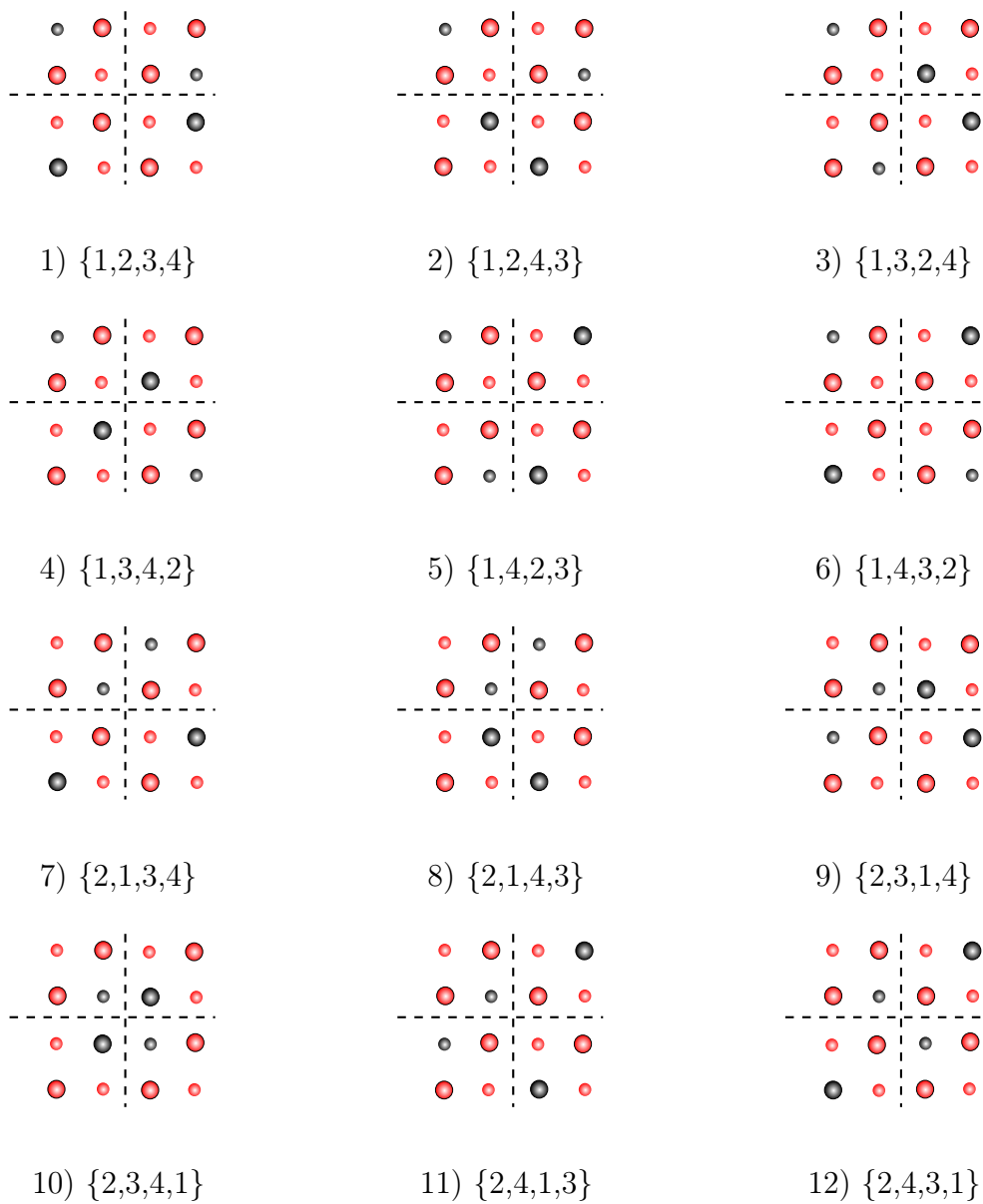
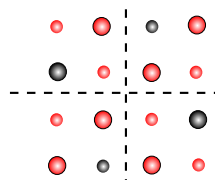
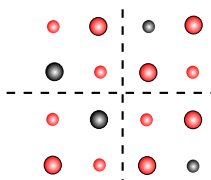


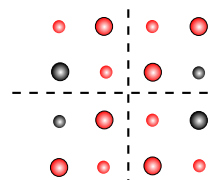
Рис. 3.4: Атомы у ядра исходной конфигурации в плане



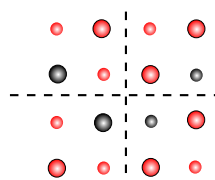
13) {3,1,2,4}



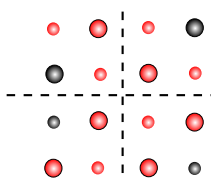
14) {3,1,4,2}



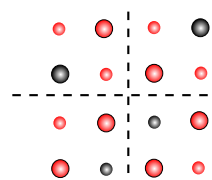
15) {3,2,1,4}



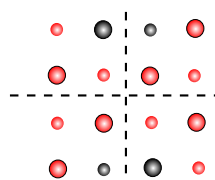
16) {3,2,4,1}



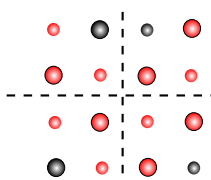
17) {3,4,1,2}



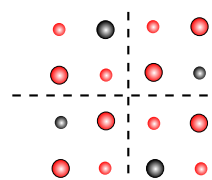
18) {3,4,2,1}



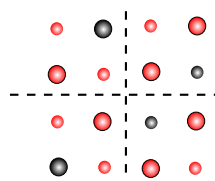
19) {4,1,2,3}



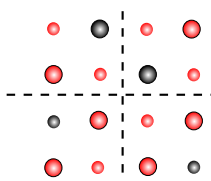
20) {4,1,3,2}



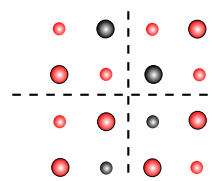
21) {4,2,1,3}



22) {4,2,3,1}



23) {4,3,1,2}



24) {4,3,2,1}

Рис. 3.5: Атомы у ядра исходной конфигурации в плане. Продолжение

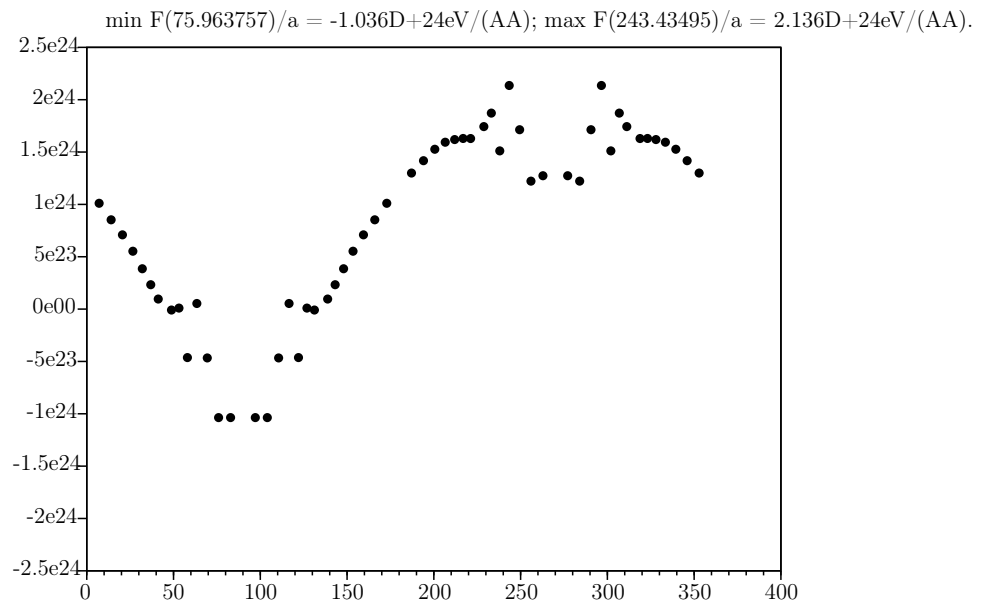


Рис. 3.6: График №1 - {1,2,3,4}

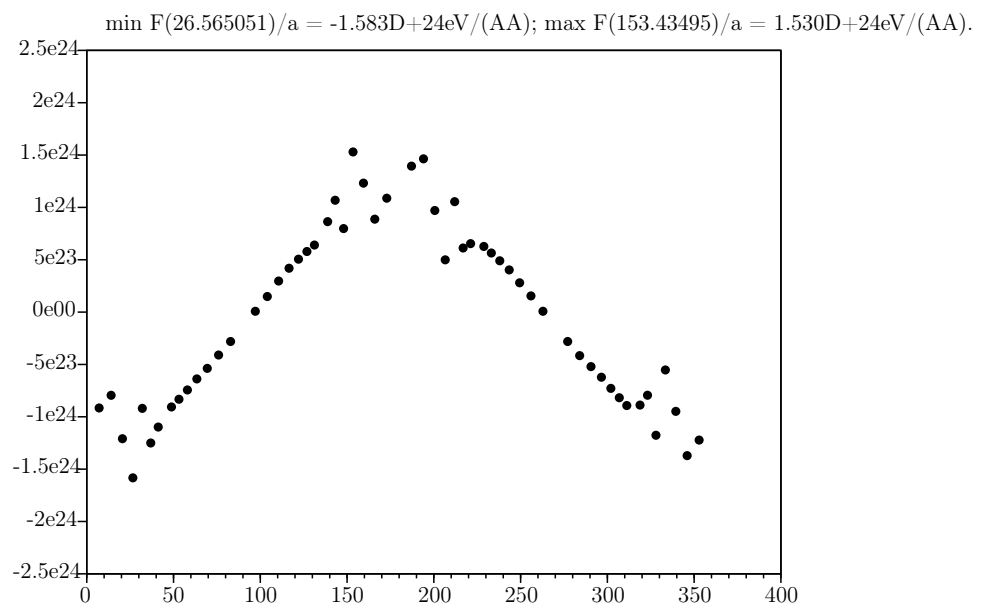


Рис. 3.7: График №2 - {1,2,4,3}



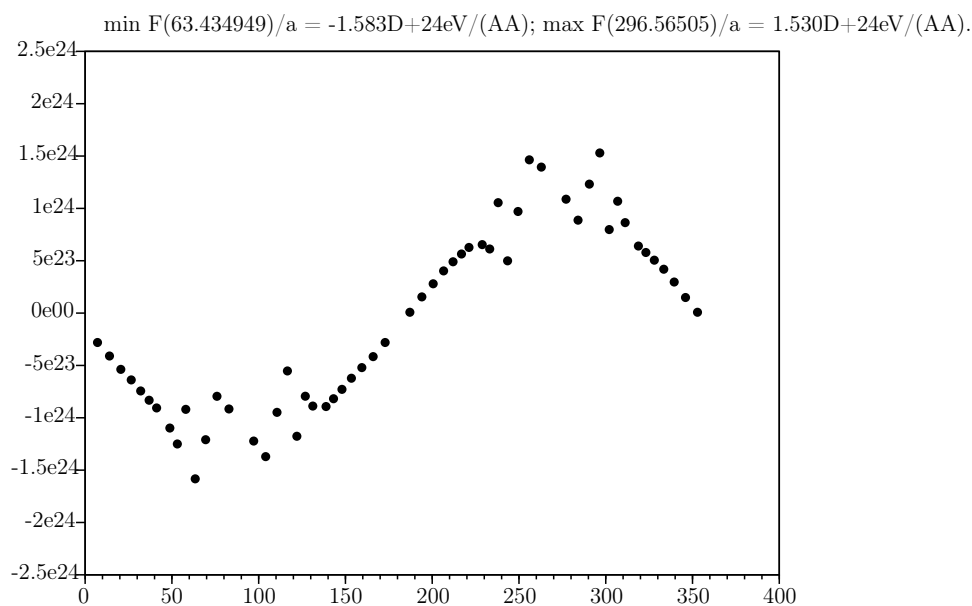


Рис. 3.8: График №3 - {1,3,2,4}

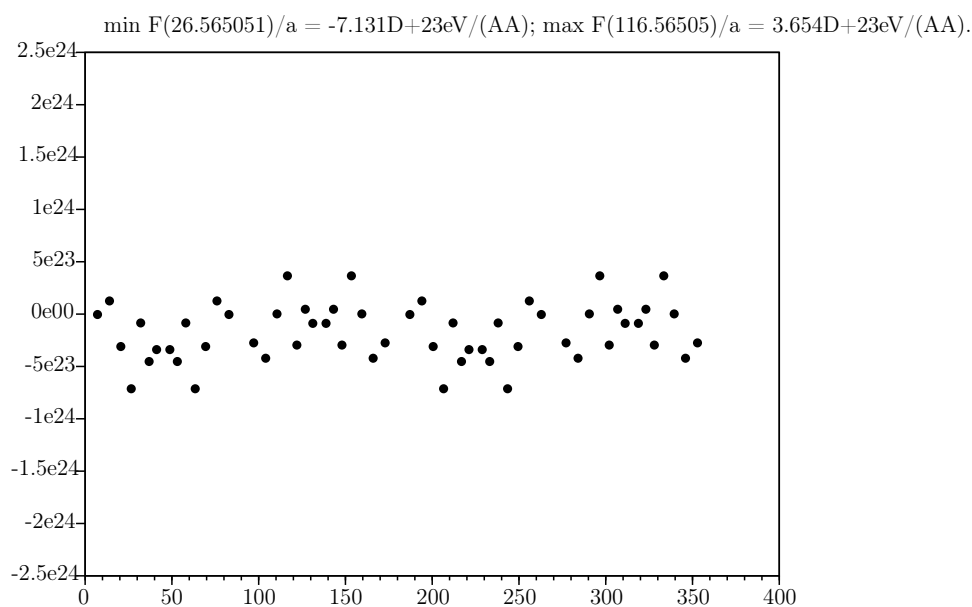


Рис. 3.9: График №4 - {1,3,4,2}

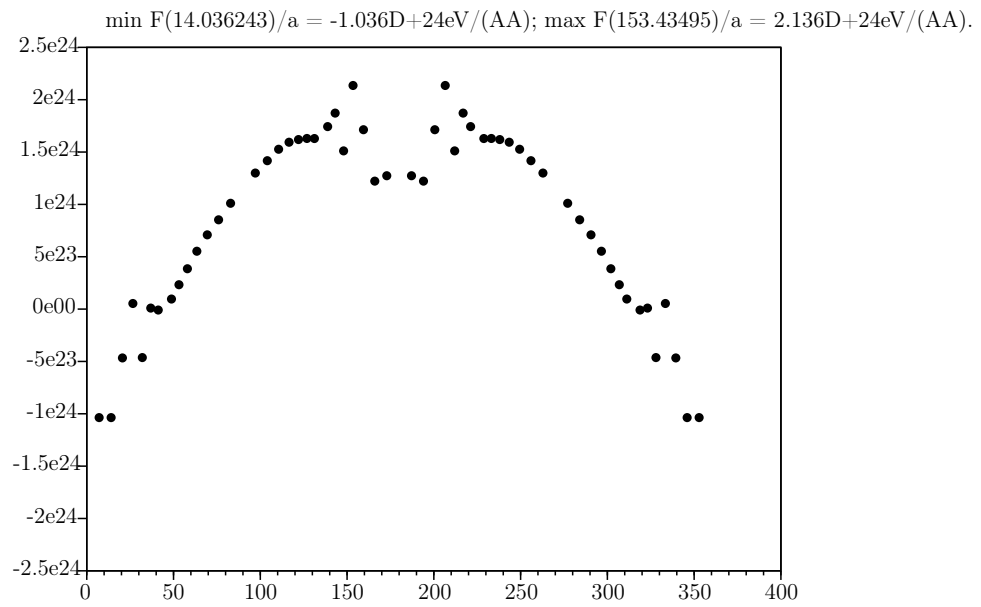


Рис. 3.10: График №5 - {1,4,2,3}

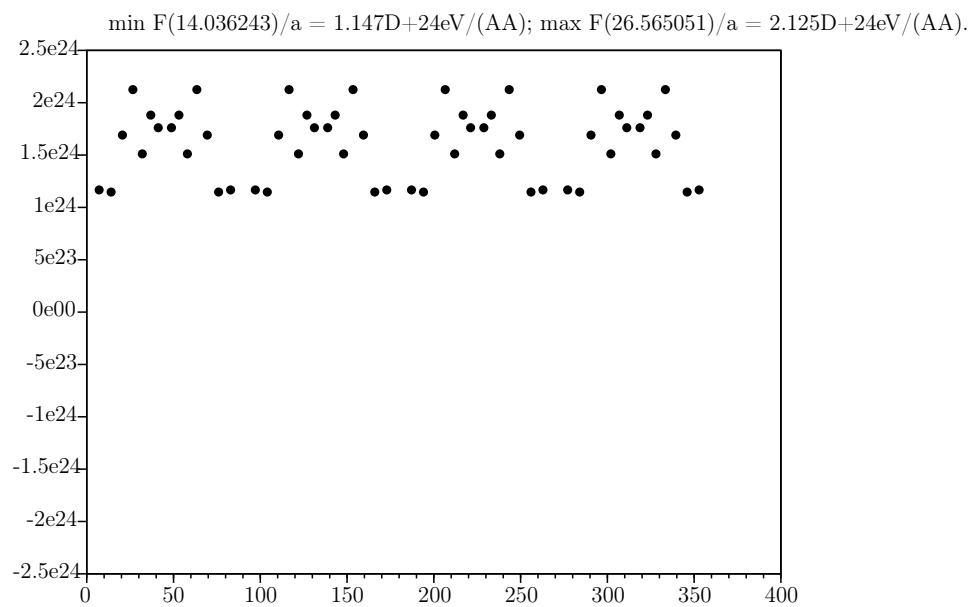


Рис. 3.11: График №6 - {1,4,3,2}

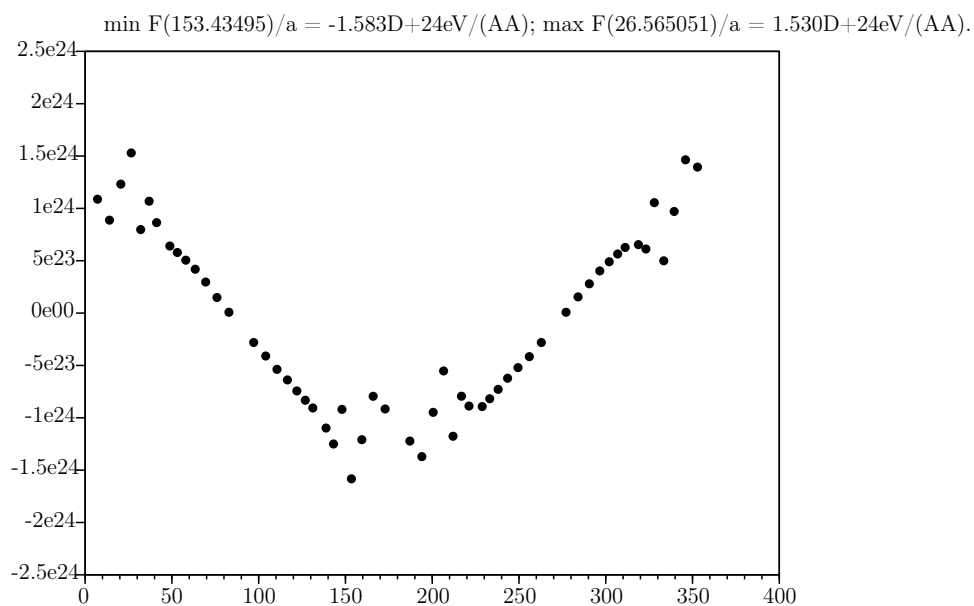


Рис. 3.12: График №7 - {2,1,3,4}

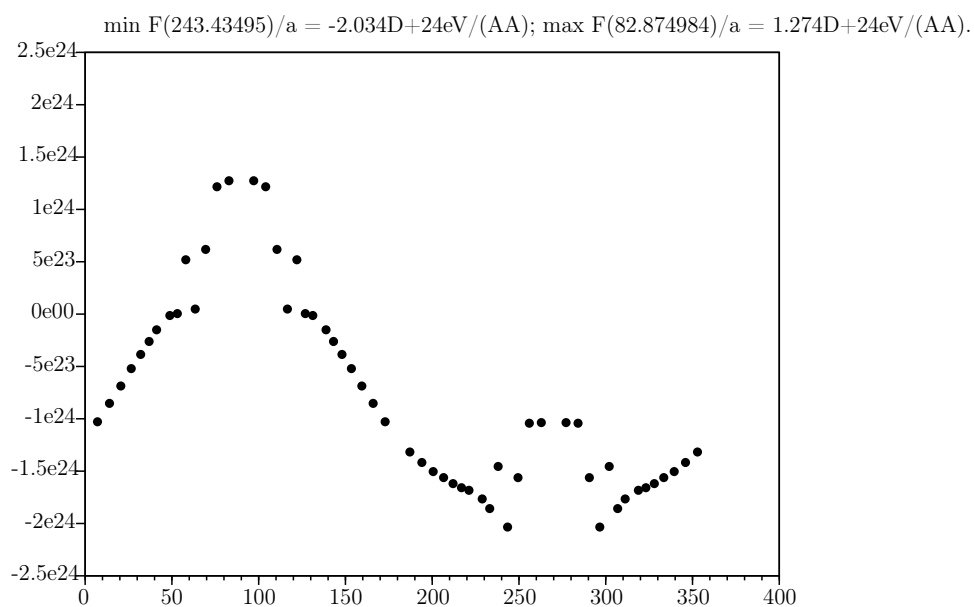


Рис. 3.13: График №8 - {2,1,4,3}

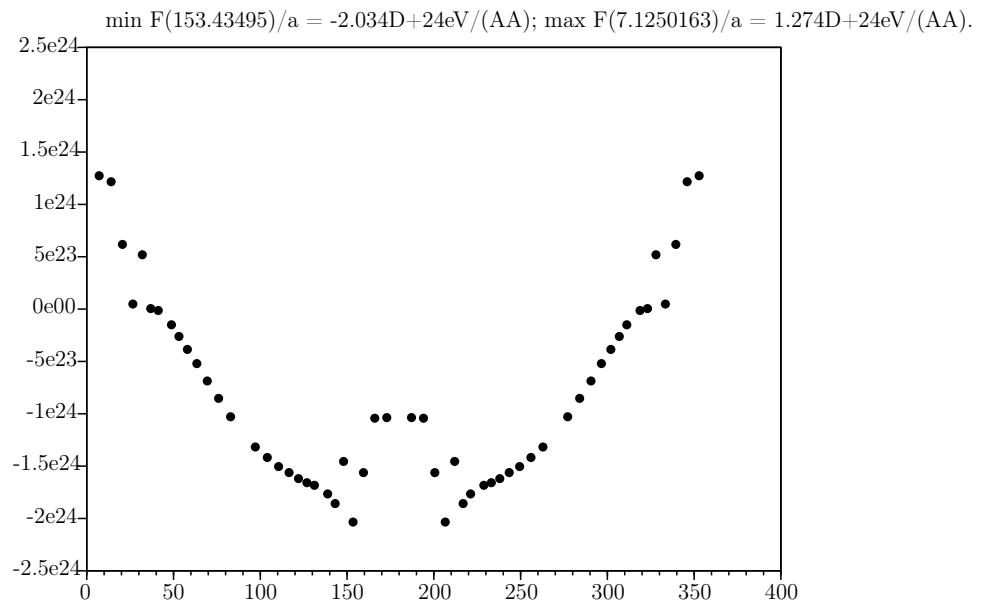


Рис. 3.14: График №9 - {2,3,1,4}

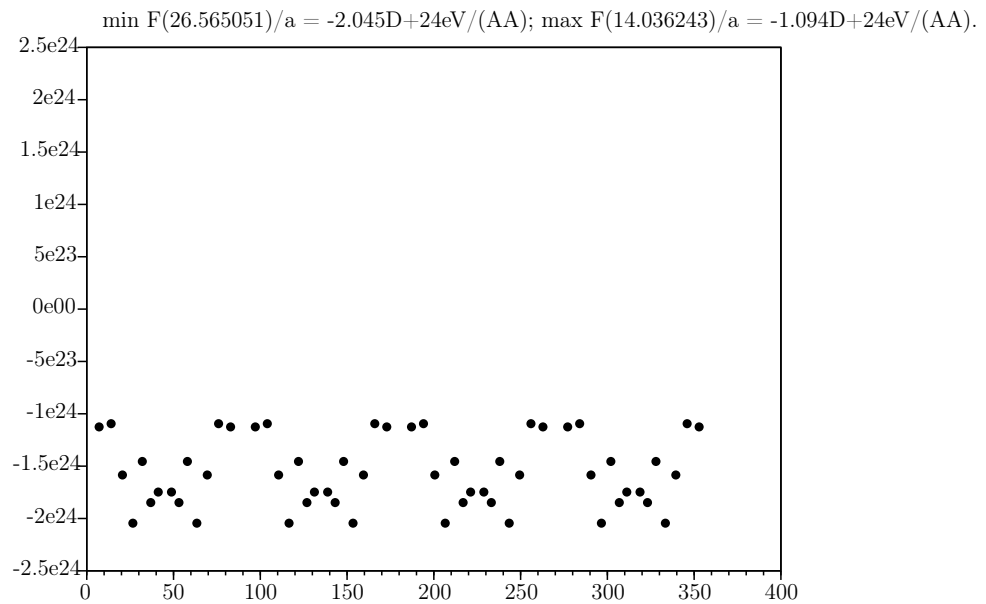


Рис. 3.15: График №10 - {2,3,4,1}

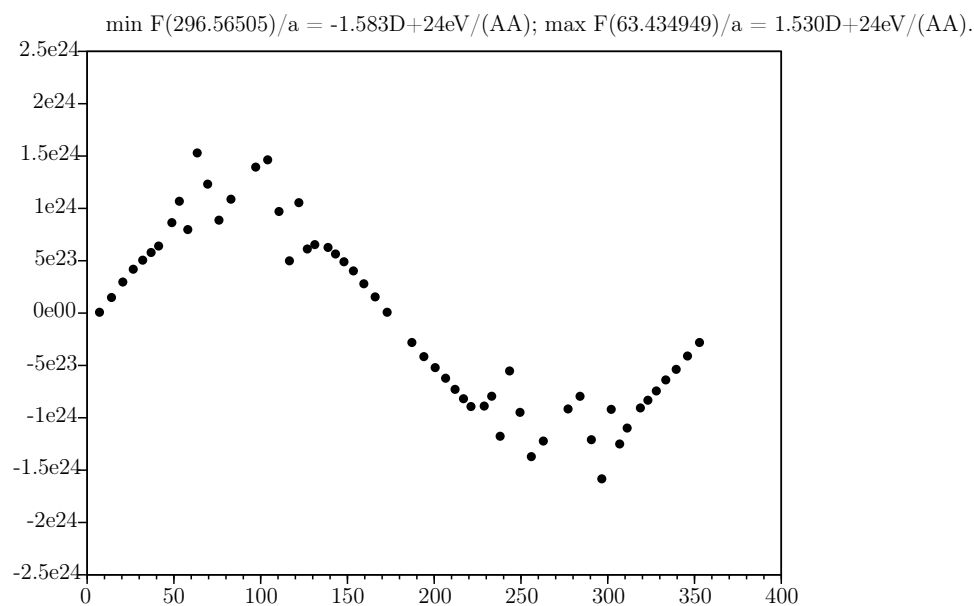


Рис. 3.16: График №11 - {2,4,1,3}

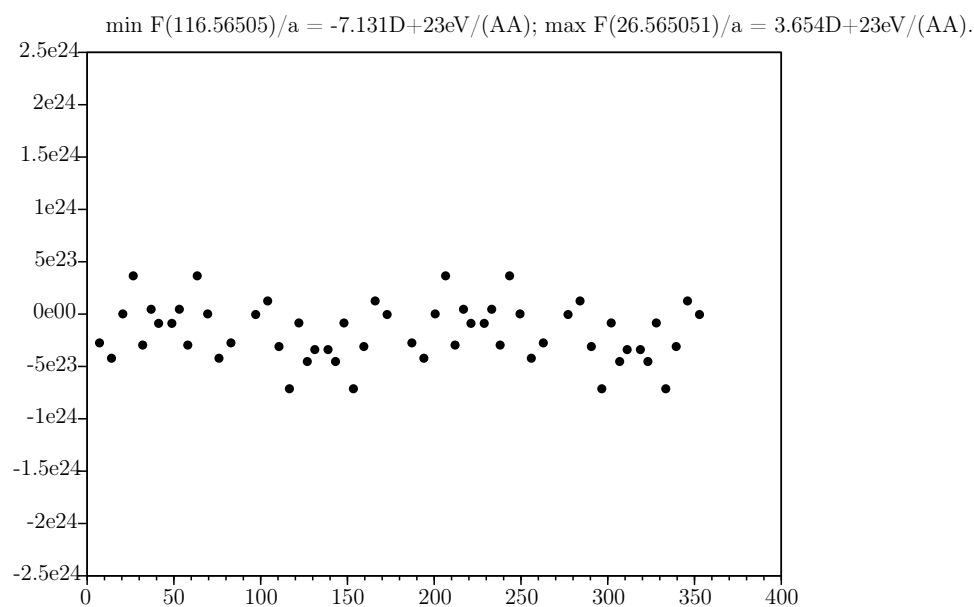


Рис. 3.17: График №12 - {2,4,3,1}

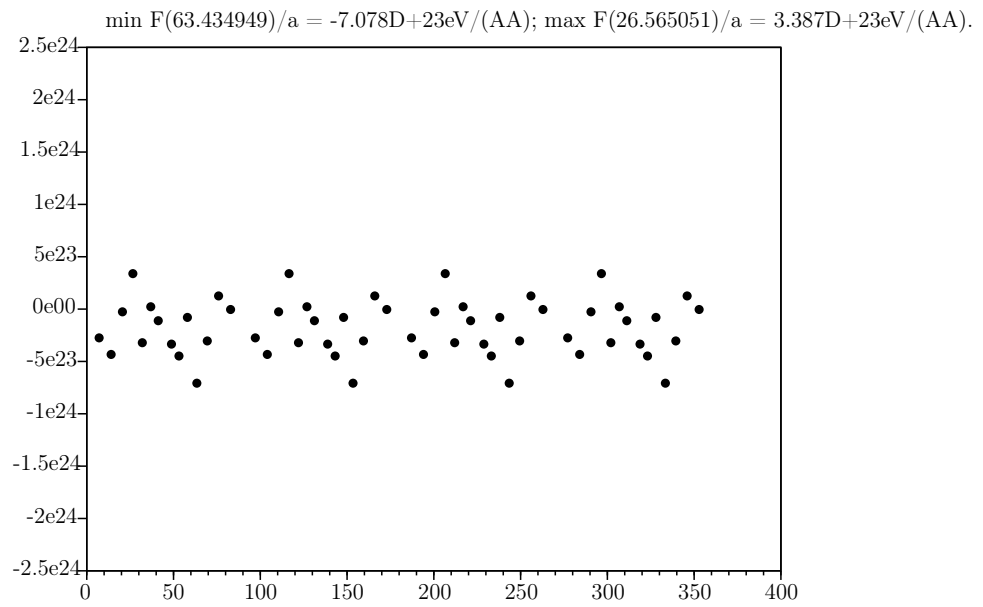


Рис. 3.18: График №13 - {3,1,2,4}

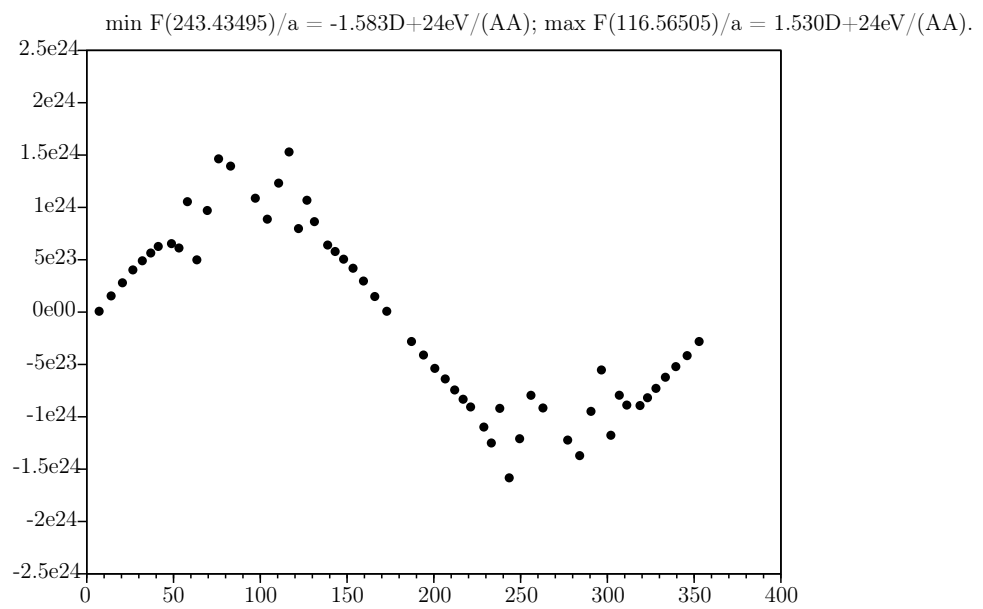


Рис. 3.19: График №14 - {3,1,4,2}

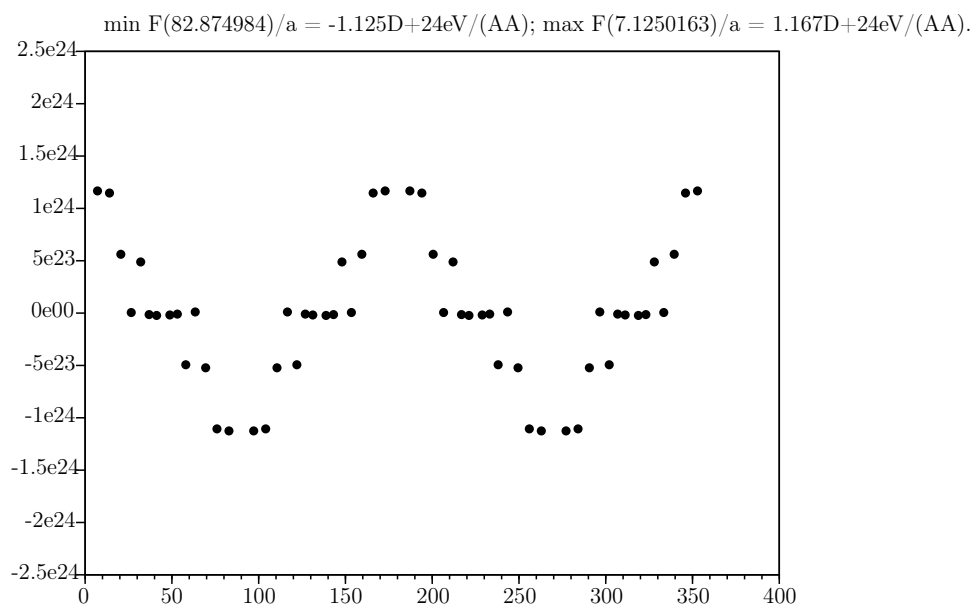


Рис. 3.20: График №15 - {3,2,1,4}

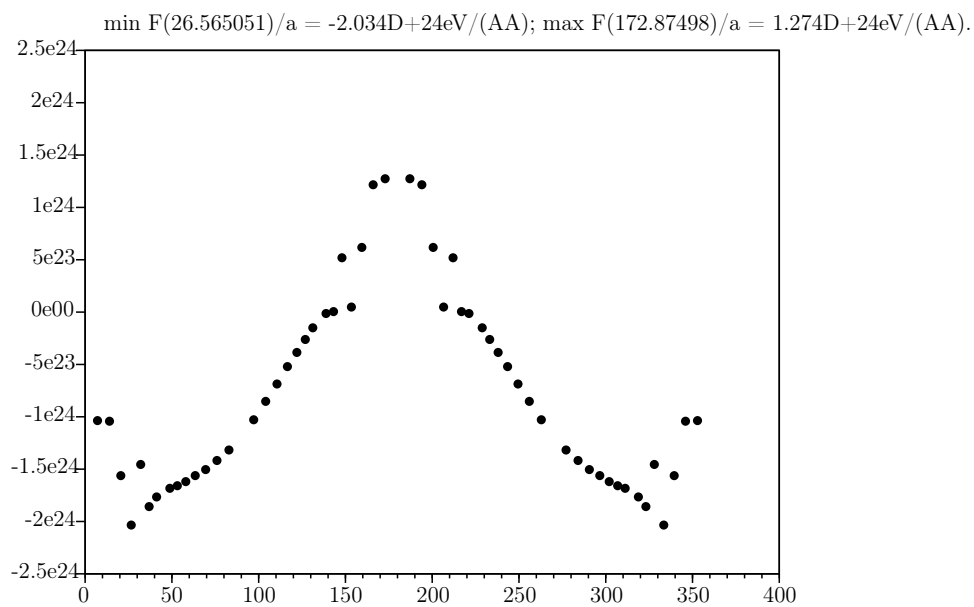


Рис. 3.21: График №16 - {3,2,4,1}

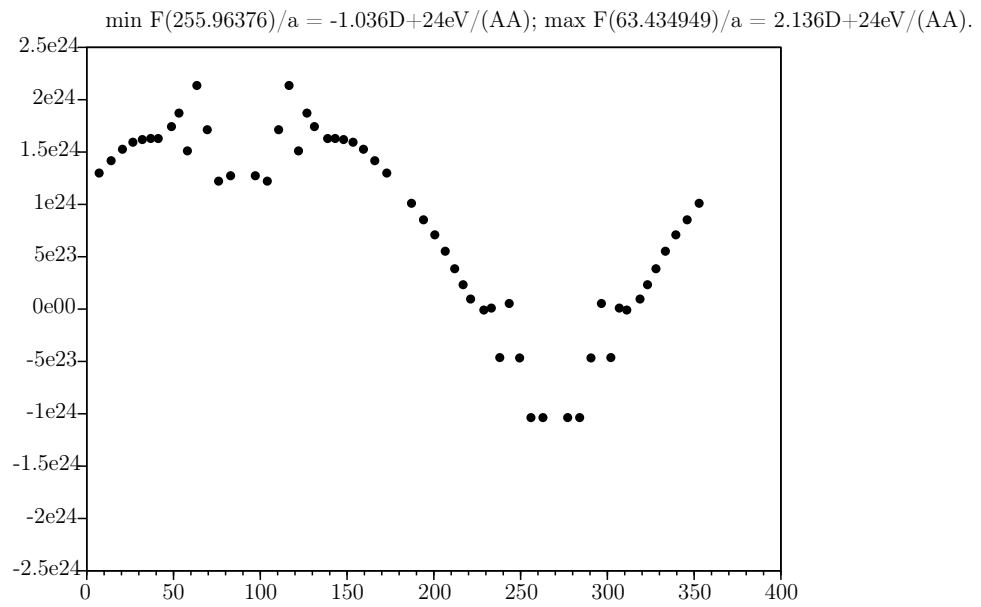


Рис. 3.22: График №17 - {3,4,1,2}

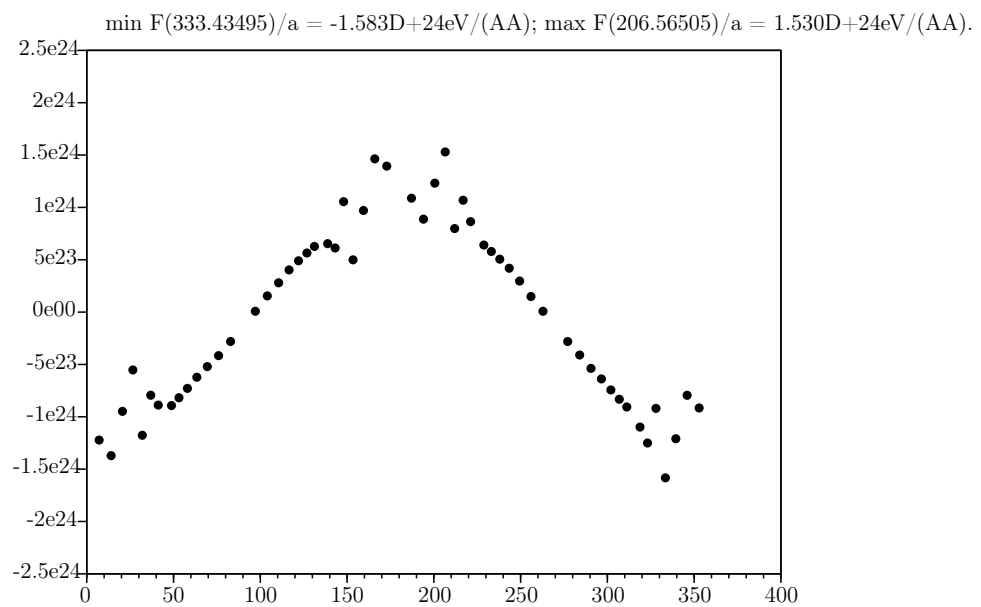


Рис. 3.23: График №18 - {3,4,2,1}



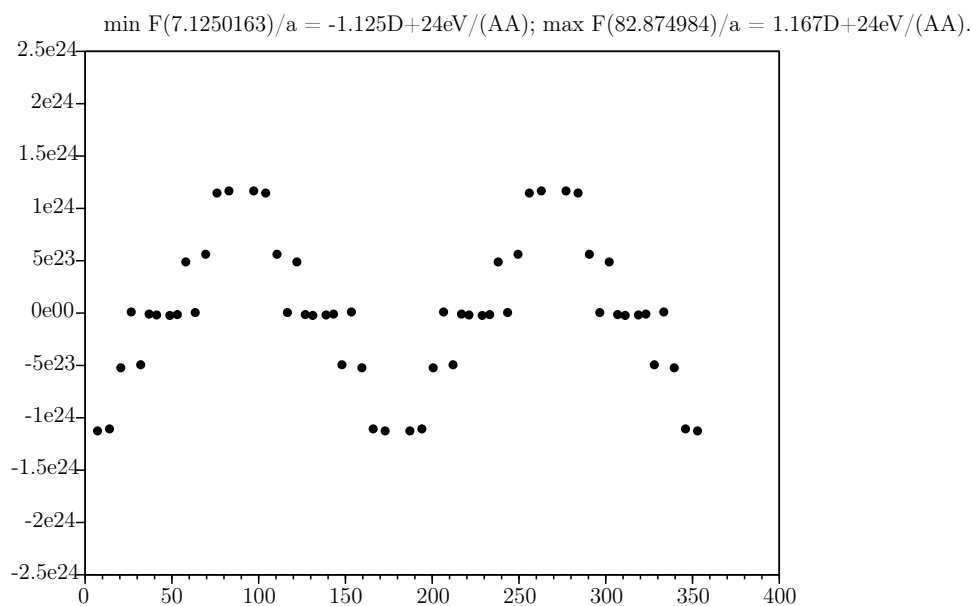


Рис. 3.24: График №19 - {4,1,2,3}

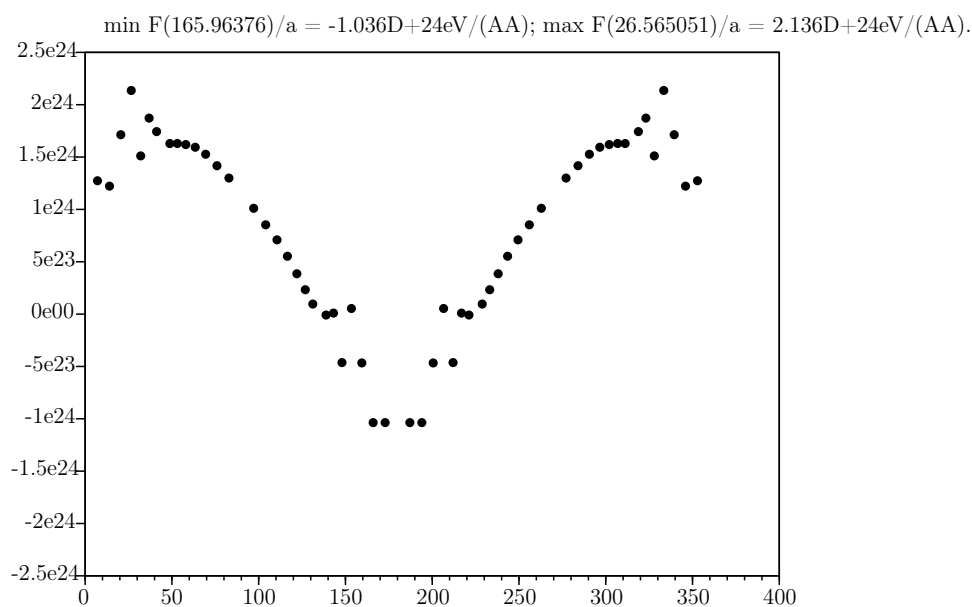


Рис. 3.25: График №20 - {4,1,3,2}

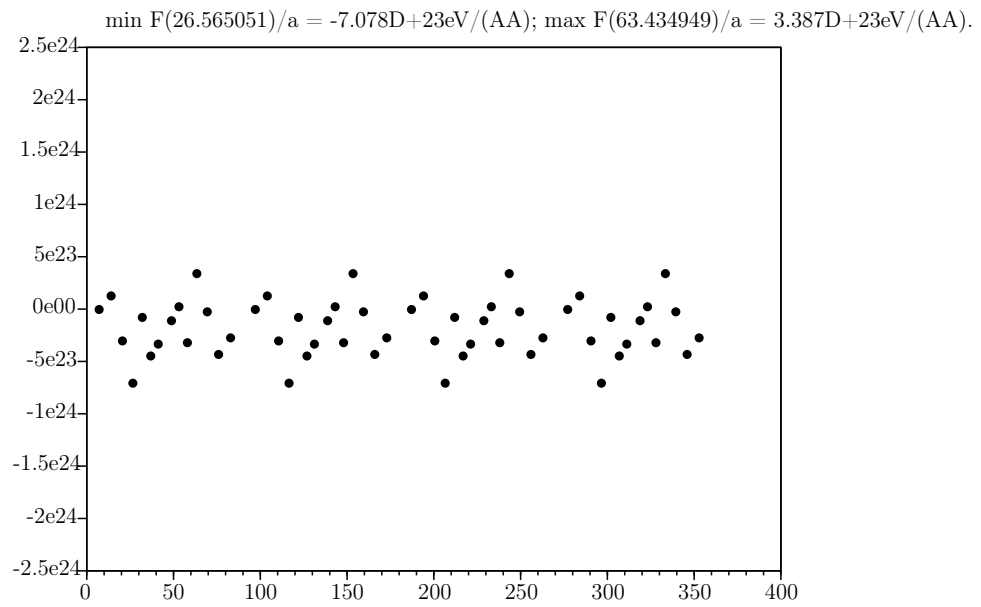


Рис. 3.26: График №21 - {4,2,1,3}

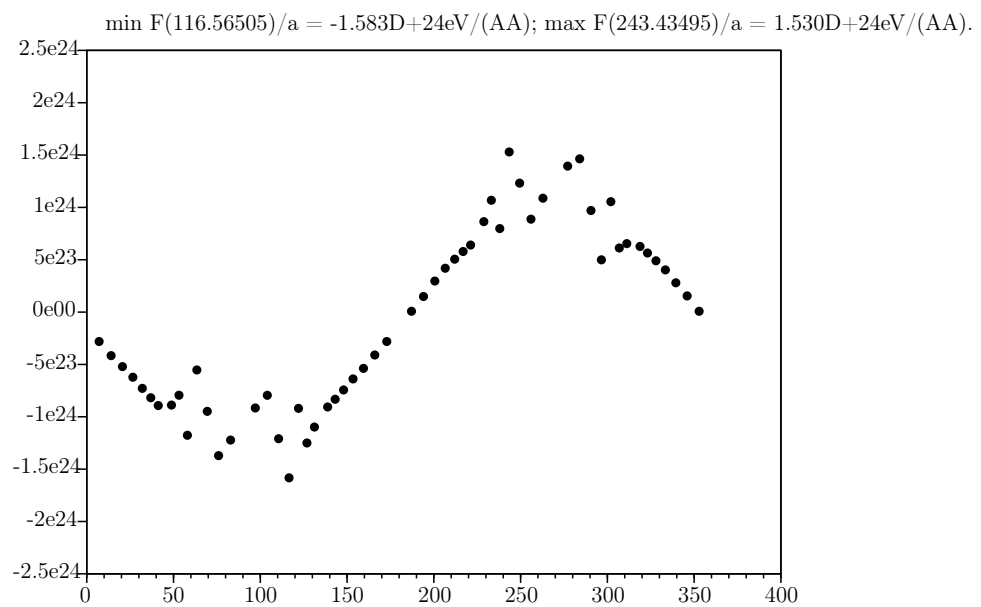


Рис. 3.27: График №22 - {4,2,3,1}

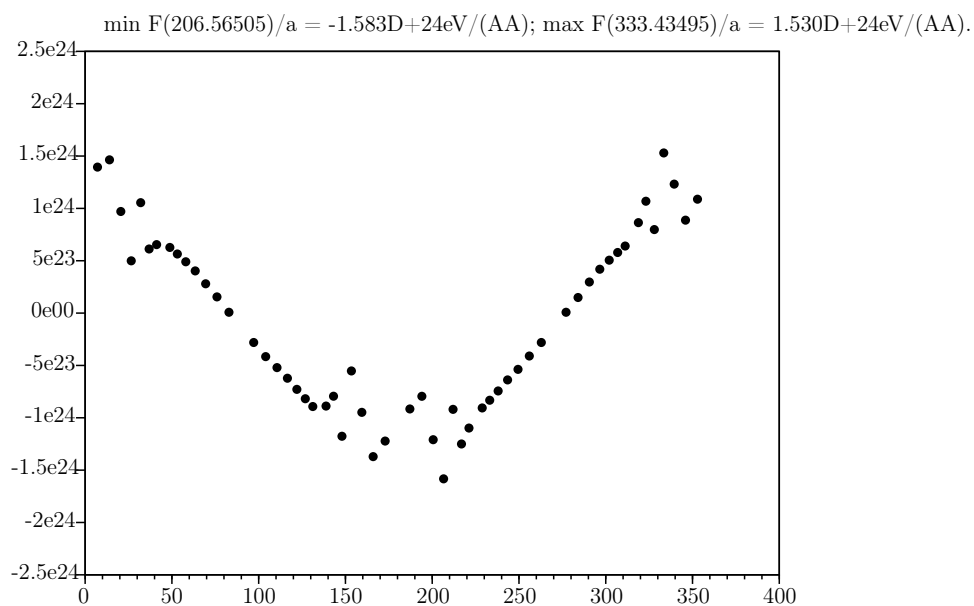


Рис. 3.28: График №23 - {4,3,1,2}

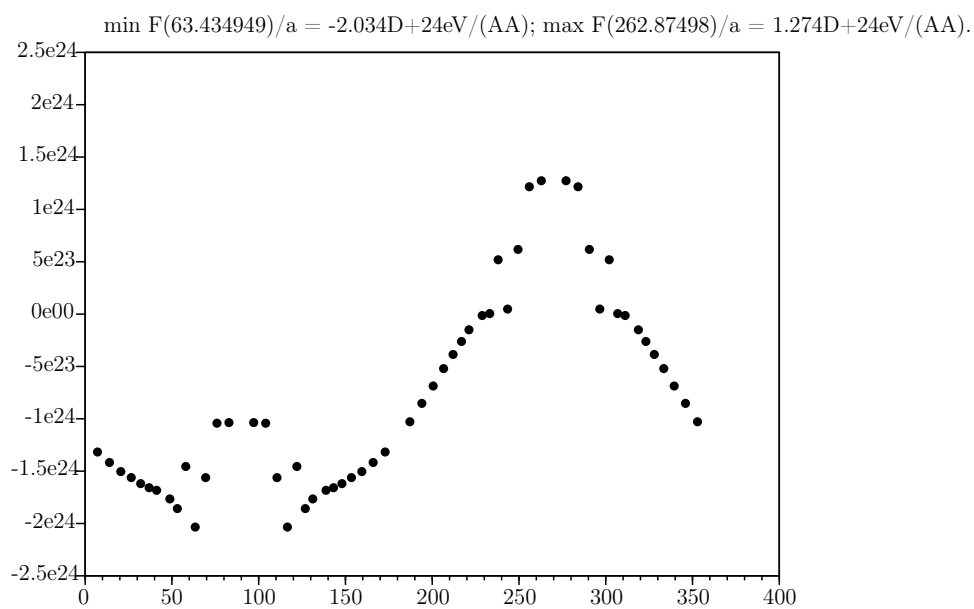


Рис. 3.29: График №24 - {4,3,2,1}

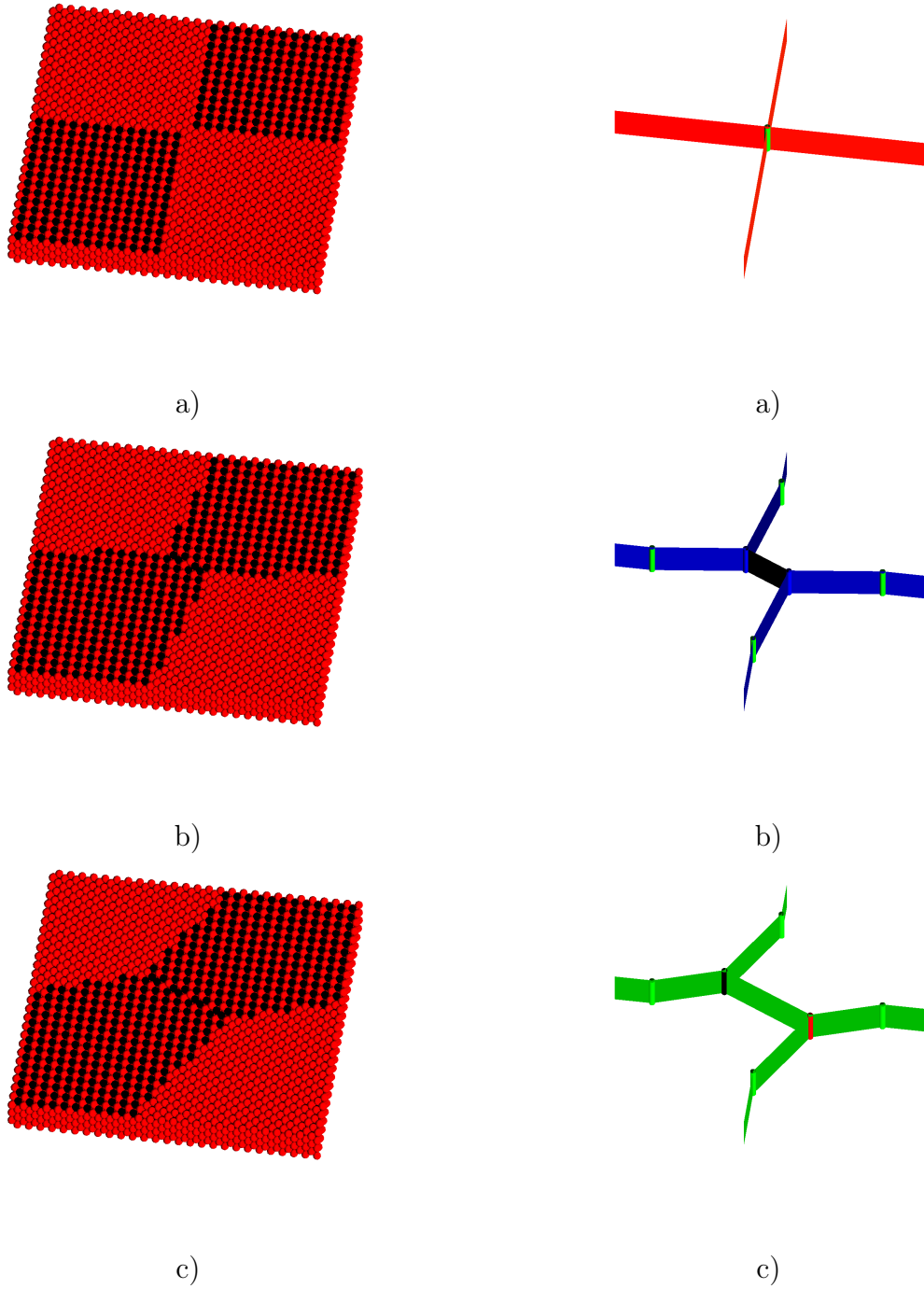


Рис. 3.30: Нестабильная, эволюционирующая конфигурация

## Глава 4

# Отображения в дефектах

Говоря о множествах в определении комплексов планарных сверхструктурных дефектов мы сталкивались с такими видами отображений, как инъекция, суръекция, биекция. Некоторые из них можно переносить непосредственно на исследуемые сложные дефекты. Другие отображения, например изоморфизм, рассматривается от части при попытке расчета энергии элемента произвольного дефекта. Далее классы дефектов, будучи сложной структурой, в которой любой элемент связан либо с аналогичным, либо является частью дефекта более высокого порядка. Их так же можно отображать, указывать соответствия согласно введенным понятиям для дефектов. Рассмотрим более подробно перечисленные случаи таких отображений.

### 4.1 Строка генерации

Перейдем к более подробному рассмотрению вопроса, лишь упомянутого в первом Томе издания, а именно строки генерации. Это понятие является базовым для матриц взаимодействия компонентов КПСД. Если сгруппировать номера зон дефекта в перестановки, то между компонентами одного класса и одинакового размера она (строка генерации) почти всегда совпадает с подстановкой. Наряду с этим ей присуща функция связывания всех компонентов КПСД из одного класса через матрицы взаимодействия. Усиленная таким образом, строка генерации требует дополнительных соглашений в математическом описании. Формально теперь это математическая категория с расширенными свойствами. Необходимо отделить это понятие от подстановки. С другой стороны строка производит, генерирует новые матрицы. Такое название адекватно новым свойствам рассматриваемой категории и является достаточным с

точки зрения семантики.

### 4.1.1 Алгоритм нахождения

Представления сверхструктуры, зоны бесконечного пространства и плоскости их порождающие, переплетенные воедино, определяют комплексы планарных сверхструктурных дефектов. Внутренняя связь этих понятий позволяет решать различные задачи, возникающие в процессе изучения данного вида дефектов без привлечения дополнительных математических объектов. Такое положение вещей позволяет предположить, что и решение задачи нахождения строки генерации не выходит за рамки уже рассмотренных математических категорий.

Прием, взятый за основу решения задачи нахождения строки генерации скорее всего не единственный. Он использует тот факт, что плоскость, введенная в первоначальный дефект, порождает дополнительные зоны в новой конфигурации. Будем считать плоскости исходного и соответствующие им плоскости нового дефекта опорными. Имеется неоспоримая связь через полупространства, определяемые такими плоскостями. Формально они совпадают. Сравнивая полупространства опорных плоскостей первоначального и нового дефектов найдем их соответствия. Из этого соответствия запишем строку генерации. Понятно, что необходимо соблюдать порядок, в котором рассматриваются плоскости. Так же важно в целом ряде случаев брать противоположно направленную плоскость в соответствии в исходным дефектом. Формируемые таким образом полупространства меняют свои знаки в обозначении на противоположные. Нас не будут интересовать конкретные координаты плоскостей. Греческие буквы в обозначении плоскостей также нужно опустить, оставив только знак полупространства. Сформулируем последовательность действий нашего приема для связывания базового и произвольного дефектов из одного класса в виде следующего Алгоритма 2.

- Алгоритм 2.**
1. *Выбирается исходное сверхструктурное размещение.*
  2. *Все его плоскости считаются как опорные.*
  3. *Записывается результирующее сверхструктурное размещение. Количество элементов строки генерации равно числу элементов результирующей конфигурации.*
  4. *В результирующем размещении выбираются плоскости, соответствующие опорным.*

5. Если вектора, определяющие опорные плоскости в конфигурациях противоположны, то меняются знаки полу пространств для этой плоскости в результирующей конфигурации на обратные.
6. Из соответствия полу пространств для опорных плоскостей каждой зоны результирующего и исходного размещений выбираются номера для строки генерации. При этом позиция для строки генерации выбирается по номеру зоны результирующей, а значение по номеру зоны исходной конфигурации.

Проще всего рассмотреть работу алгоритма на конкретном примере.

Пример 1: Введение дополнительной плоскости, параллельной планарному дефекту.

Первоначальный планарный дефект.

Зоны до введения плоскости:

1(-);

2(+).

Новый планарный дефект.

Зоны после введения плоскости:

1(-, -);

2(+, -);

3(+, +).

Пусть первый столбец содержит полупространства плоскости, формирующей дефект. Этот столбец соответствует нашей опорной плоскости. По нему и будем проводить сравнение. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 3. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной.

Первая зона:

1(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Напомним, что сравнение идет по первому столбцу. Вторым столбцом, соответствующий второй не опорной плоскости при этом не важен. Следовательно первый элемент строки генерации равен 1.

Вторая зона:

2(+, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно второй элемент строки генерации равен 2.

Третья зона:

3(+, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно третий элемент строки генерации равен 2.

Получилась строка генерации вида:

(1,2,2).

Пример 2: Введение дополнительной плоскости, не параллельной планарному дефекту.

Первоначальный планарный дефект.

Зоны до введения плоскости:

1(-);

2(+).

Новый планарный дефект.

Зоны после введения плоскости:

1(-, -);

2(+, -);

3(-, +);

4(+, +).

Пусть первый столбец содержит полупространства первоначального планарного дефекта. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 4. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной:

(1,2,1,2).

Пример 3: Поворот плоскостей из результирующей конфигурации второго примера, в результате которого первая плоскость переходит во вторую, вторая в обратную первой.

Зоны до

1(-, -);

2(+, -);

3(-, +);

4(+, +),

и после операции:

1(-, -);

2(+, -);

3(-, +);



$4(+, +)$ .

Но теперь первый столбец содержит полупространства второй плоскости. Второй столбец содержит полупространства, обратные первой плоскости. Опорные плоскости вторая и обратная первой. Число рассматриваемых столбцов равно числу плоскостей в первоначальной конфигурации. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 4.

Первая зона до:  $1(-,-)$ .

Меняем местами полупространства:  $1(-,-)$ .

Меняем знак:  $1(-,+)$ .

Такому положению вещей соответствует зона:

$3(-, +)$ ,

следовательно первый элемент строки генерации равен 3.

Вторая зона до:  $2(+,-)$ .

Меняем местами полупространства:  $2(-,+)$ .

Меняем знак:  $2(-,-)$ .

Такому положению вещей соответствует зона:

$1(-, -)$ ,

следовательно второй элемент строки генерации равен 1.

Третья зона до:  $3(-,+)$ .

Меняем местами полупространства:  $3(+,-)$ .

Меняем знак:  $3(+,+)$ .

Такому положению вещей соответствует зона:

$4(+, +)$ ,

следовательно третий элемент строки генерации равен 4.

Четвертая зона до:  $4(+,+)$ .

Меняем местами полупространства:  $4(+,+)$ .

Меняем знак:  $4(+,-)$ .

Такому положению вещей соответствует зона:

$2(+, -)$ ,

следовательно четвертый элемент строки генерации равен 2.

В результате имеем строку генерации вида:

$(3,1,4,2)$ .

#### 4.1.2 Классы

В объединении различных конфигураций  $K$  и  $L$  в один класс КПСД необходимым и достаточным условием считается наличие строки генерации  $Str$ , связывающей матрицы взаимодействия их компонентов функцией

$$L_i = Gen(Str, K_j) : i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Неоспоримо достаточность этого условия. Приведем его, повторяя доводы, изложенные в первом Томе. Если существует матрица строка, связывающая матрицы взаимодействия элементов двух комплексов, то они принадлежат одному классу. Данное утверждение указывает на то, что количество компонентов КПСД совпадает и каждому элементу одного комплекса ставится в соответствие элемент второго комплекса с соответствующей матрицей взаимодействия. По этому признаку и проводится классификация КПСД. Следовательно утверждение верно.

Одному классу принадлежат комплексы у которых могут быть дополнительные плоскости, не меняющие характер взаимодействия, а только порождающие дополнительные зоны. Данное утверждение верно и для них. При этом число компонентов и, соответственно, матриц равно.

### 4.1.3 Обратное связывание

Мы определили строку генерации для матриц компонентов КПСД из одного класса. Имеет принципиальное значение сделать следующее утверждение:

Если существует строка генерации  $Str1$ , связывающей матрицы взаимодействия компонентов КПСД  $K$  и  $L$  функцией

$$L_i = Gen(Str1, K_j) : \{ij\} = 1, 2, \dots, \{nm\}.$$

то существует и строка генерации  $Str2$ , связывающей матрицы взаимодействия компонентов КПСД  $L$  и  $K$  функцией

$$K_j = Gen(Str2, L_i) : \{ij\} = 1, 2, \dots, \{nm\}.$$

Такая запись подразумевает обратное связывание.

Для реализации связывания, скажем, конфигураций после введения дополнительной плоскости наряду с добавлением, клонированием соответствующих строк и столбцов становится необходимым обеспечить и их удаление, вычеркивание. Договоримся в таком случае удалять строки и столбцы в полученной матрице, которые отсутствуют в строке генерации. Оговорим процедуру генерации. Вначале вставим на соответствующее место в искомой матрице взаимодействия столбцы исходной согласно строке генерации. Затем проделаем процедуру сортировки строк в точном соответствии предыдущему шагу. Если количество элементов в

строке генерации меньше размера исходной матрицы, то лишние строки и столбцы в искомой мы удаляем. Обратим внимание, что размер искомой матрицы всегда равен числу элементов строки генерации.

Приведем строку генерации для поворота из Примера 2:

(1,2,1,2).

На этом Примере запишем строку для обратного связывания в виде:

(1,2).

Необходимо отметить, что при обратном связывании валидной будет не одна, а несколько строк генерации. В данном случае, в дополнение к уже приведенной, это:

(1,4);

(3,2);

(3,4).

Матрицы взаимодействия, полученные таким образом с использованием каждого из вариантов строки генерации тождественны.

Замечателен следующий пример, так же использующий обратное связывание для нахождения строки генерации, изображенный на Рис.(4.1). Пусть имеются две конфигурации из одного класса с одинаковым числом зон. Они формируются с использованием дополнительной плоскости. Плоскость, априори, формирует две новые зоны. Так как конфигурации принадлежат одному классу, они имеют один и тот же исходный дефект. Обе плоскости исходного дефекта являются опорными при вычислении строки генерации. Так же важен и порядок их рассмотрения.

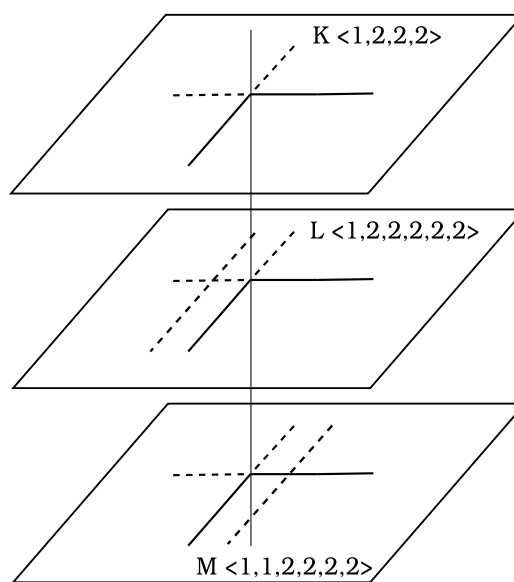


Рис. 4.1: Схема связывания

Исходный дефект, описываемый конфигурацией  $K = \langle 1, 2, 2, 2 \rangle$  с матрицами взаимодействия:

$$\begin{aligned} \dot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.1}$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned} \dot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.3}$$

При этом конфигурация  $L = \langle 1, 2, 2, 2, 2, 2 \rangle$  с матрицами взаимодействия:

$$\begin{aligned} \dot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.5}$$

$$\begin{aligned} \dot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.6}$$

имеет одну зону из всех, заполненную атомами другого представления. Опустим прохождение алгоритма нахождения строки генерации — для этого примера он очевиден.

$$L_i = \text{Gen}((1, 2, 2, 3, 4, 4), K_i) : i = 1, 2, 3.$$

При этом:

$$K_i = \text{Gen}((1, 2, 4, 5, 0, 0), L_i) : i = 1, 2, 3.$$

Во второй конфигурации  $M = \langle 1, 1, 2, 2, 2, 2 \rangle$  с матрицами взаимодействия:

$$\begin{aligned} \dot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned} \dot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{D}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned} \dot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{U}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \end{aligned} \quad (4.9)$$

таких зон две:

$$M_i = Gen((1, 1, 2, 3, 3, 4), K_i) : i = 1, 2, 3;$$

$$K_i = Gen((1, 3, 4, 6, 0, 0), M_i) : i = 1, 2, 3.$$

При нахождение связывания между  $L$  и  $M$  опорные плоскости не дадут строку генерации в следствии того, что вторая плоскость в первом случае формирует дефект, а во втором случае является дополнительной.

И здесь нас снова выручит обратное связывание. Приводя обе конфигурации к базовой и уже от нее вычисляя строку генерации получим:

$$M_i = Gen((1, 1, 2, 4, 4, 5), L_i) : i = 1, 2, 3$$

и, соответственно

$$L_i = Gen((1, 3, 3, 4, 6, 6), M_i) : i = 1, 2, 3.$$

В этом случае, как и для любого примера, использующего обратное связывание, имеем несколько вариантов строки генерации.

Здесь можно привести аналогию с оптической голограммой, когда в любом фрагменте такого снимка заключается исходное изображение. Так и в случае с произвольной зоной КПСД, полученной после введения дополнительной плоскости. Она так или иначе несет на себе отпечаток всех взаимодействий с другими зонами. И неважно какого она размера или формы. С точки зрения информации о взаимодействии здесь царит полное равноправие.

#### 4.1.4 Строки генерации в примерах

Рассмотрим подробно несколько строк генерации, поясняющих изложенное выше.

##### Строка 1

Первоначальный дефект. Зоны до введения плоскостей:

$$1(-, -);$$

$$2(+, -);$$

$$3(-, +);$$

$$4(+, +).$$

Новый дефект. Зоны после введения плоскостей:

$$1(-, -, -, -, -);$$

$$2(+, -, -, -, -);$$

$$3(+, +, -, -, -);$$

$$4(-, -, -, +, -);$$

$$5(+, -, -, +, -);$$

$$6(-, -, +, +, -);$$

$$7(-, -, -, -, +);$$

$$8(-, +, -, -, +);$$

$$9(+, +, -, -, +);$$

$$10(-, -, +, -, +);$$

$$11(-, +, +, -, +);$$

$$12(-, -, +, +, +).$$

Опорные плоскости первая и вторая. Это столбец номер один и номер два. По ним и будем проводить сравнение. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 12. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной.

Первая зона, представленная первым и вторым столбцами:

$$1(-, -).$$



Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Напомним, что сравнение идет по первому и второму столбцу конечной конфигурации. Другие столбцы, соответствующие не опорным плоскостям при этом не важны. Следовательно первый элемент строки генерации равен 1.

Вторая зона:

2(+, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+, -).

Следовательно второй элемент строки генерации равен 2.

Третья зона:

3(+, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

4(+, +).

Следовательно третий элемент строки генерации равен 4.

Четвертая зона:

4(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Следовательно четвертый элемент строки генерации равен 1.

Пятая зона:

5(+, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+, -).

Следовательно пятый элемент строки генерации равен 2.

Шестая зона:

6(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Следовательно шестой элемент строки генерации равен 1.

Седьмая зона:

7(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Следовательно седьмой элемент строки генерации равен 1.

Восьмая зона:

8(-, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

3(-, +).

Следовательно восьмой элемент строки генерации равен 3.

Девятая зона:

9(+, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

4(+, +).

Следовательно девятый элемент строки генерации равен 4.

Десятая зона:

10(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Следовательно десятый элемент строки генерации равен 1.

Одиннадцатая зона:

11(-, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

3(-, +).

Следовательно одиннадцатый элемент строки генерации равен 3.

Двенадцатая зона:

12(-, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -).

Следовательно двенадцатый элемент строки генерации равен 1.

Получили строку вида (1, 2, 4, 1, 2, 1, 1, 3, 4, 1, 3, 1).

## Строка 2

Первоначальный дефект. Зоны до введения плоскостей:

1(-, -, -);

2(+, -, -);

3(+, +, -);

4(-, -, +);

5(-, +, +);

6(+, +, +).

Новый дефект. Зоны после введения плоскостей:

1(-, -, -, -, -);

2(+, -, -, -, -);

3(+, +, -, -, -);

4(-, -, -, +, -);

5(+, -, -, +, -);

6(-, -, +, +, -);

7(-, -, -, -, +);

8(-, +, -, -, +);

9(+, +, -, -, +);

10(-, -, +, -, +);

11(-, +, +, -, +);

12(-, -, +, +, +).

Опорные плоскости первая, вторая и пятая. Это столбец номер один, номер два и номер пять. По ним и будем проводить сравнение. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 12. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной.

Первая зона, представленная первым, вторым и пятым столбцами:

1(-, -, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -, -).

Напомним, что сравнение идет по первому и второму столбцу конечной конфигурации. Другие столбцы, соответствующие не опорным плоскостям при этом не важны. Следовательно первый элемент строки генерации равен 1.

Вторая зона:

$2(+, -, -)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$2(+, -, -)$ .

Следовательно второй элемент строки генерации равен 2.

Третья зона:

$3(+, +, -)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$3(+, +, -)$ .

Следовательно третий элемент строки генерации равен 3.

Четвертая зона:

$4(-, -, -)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$1(-, -, -)$ .

Следовательно четвертый элемент строки генерации равен 1.

Пятая зона:

$5(+, -, -)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$2(+, -, -)$ .

Следовательно пятый элемент строки генерации равен 2.

Шестая зона:

$6(-, -, -)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$1(-, -, -)$ .

Следовательно шестой элемент строки генерации равен 1.

Седьмая зона:

$7(-, -, +)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$4(-, -, +)$ .

Следовательно седьмой элемент строки генерации равен 4.

Восьмая зона:

$8(-, +, +)$ .

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$5(-, +, +)$ .

Следовательно восьмой элемент строки генерации равен 5.

Девятая зона:

9(+, +, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

6(+, +, +).

Следовательно девятый элемент строки генерации равен 6.

Десятая зона:

10(-, -, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

4(-, -, +).

Следовательно десятый элемент строки генерации равен 4.

Одиннадцатая зона:

11(-, +, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

5(-, +, +).

Следовательно одиннадцатый элемент строки генерации равен 5.

Двенадцатая зона:

12(-, -, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

4(-, -, +).

Следовательно двенадцатый элемент строки генерации равен 4.

Получили строку вида (1, 2, 3, 1, 2, 1, 4, 5, 6, 4, 5, 4).

### Строка 3

Первоначальный дефект. Зоны до введения плоскостей:

1(-, -, -, -, -);

2(+, -, -, -, -);

3(+, +, -, -, -);

4(-, -, -, +, -);

5(+, -, -, +, -);

6(-, -, +, +, -);

7(-, -, -, -, +);

8(-, +, -, -, +);

$$9(+, +, -, -, +);$$

$$10(-, -, +, -, +);$$

$$11(-, +, +, -, +);$$

$$12(-, -, +, +, +).$$

Новый дефект. Зоны после введения плоскостей:

$$1(-, -, -, -, -);$$

$$2(+, -, -, -, -);$$

$$3(+, +, -, -, -);$$

$$4(-, -, -, +, -);$$

$$5(+, -, -, +, -);$$

$$6(-, -, +, +, -);$$

$$7(-, -, -, -, +);$$

$$8(-, +, -, -, +);$$

$$9(+, +, -, -, +);$$

$$10(-, -, +, -, +);$$

$$11(-, +, +, -, +);$$

$$12(-, -, +, +, +).$$

Опорные плоскости третья, четвертая, первая, вторая и обратная пятой. Эти столбцы в таком порядке и будем сравнивать. Знак пятого столбца меняем на обратный. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 12. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной.

Первая зона:

$$1(-, -, -, -, +).$$

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

$$7(-, -, -, -, +).$$

Следовательно первый элемент строки генерации равен 7.

Вторая зона:

$$2(-, -, +, -, +).$$

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

10(-, -, +, -, +).

Следовательно второй элемент строки генерации равен 10.

Третья зона:

3(-, -, +, +, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

12(-, -, +, +, +).

Следовательно третий элемент строки генерации равен 12.

Четвертая зона:

4(-, +, -, -, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

8(-, +, -, -, +).

Следовательно четвертый элемент строки генерации равен 8.

Пятая зона:

5(-, +, +, -, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

11(-, +, +, -, +).

Следовательно пятый элемент строки генерации равен 11.

Шестая зона:

6(+, +, -, -, +).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

9(+, +, -, -, +).

Следовательно шестой элемент строки генерации равен 9.

Седьмая зона:

7(-, -, -, -, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-, -, -, -, -).

Следовательно седьмой элемент строки генерации равен 1.

Восьмая зона:

8(-, -, -, +, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

4(-, -, -, +, -).

Следовательно восьмой элемент строки генерации равен 4.

Девятая зона:

9(-, -, +, +, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

6(-, -, +, +, -).

Следовательно девятый элемент строки генерации равен 6.

Десятая зона:

10(+, -, -, -, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+, -, -, -, -).

Следовательно десятый элемент строки генерации равен 2.

Одиннадцатая зона:

11(+, -, -, +, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

5(+, -, -, +, -).

Следовательно одиннадцатый элемент строки генерации равен 5.

Двенадцатая зона:

12(+, +, -, -, -).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

3(+, +, -, -, -).

Следовательно двенадцатый элемент строки генерации равен 3.

Получили строку вида (7, 10, 12, 8, 11, 9, 1, 4, 6, 2, 5, 3).

#### Строка 4

Первоначальный дефект. Зоны до введения плоскостей:

1(-);

2(+).

Новый дефект. Зоны после введения плоскостей:

1(-, -, -, -, -);

2(+, -, -, -, -);

3(+, +, -, -, -);

4(-, -, -, +, -);

5(+, -, -, +, -);



6(-, -, +, +, -);

7(-, -, -, -, +);

8(-, +, -, -, +);

9(+, +, -, -, +);

10(-, -, +, -, +);

11(-, +, +, -, +);

12(-, -, +, +, +).

Опорная плоскости пятая. Строка генерации содержит количество элементов, равных числу зон результирующей конфигурации, то есть 12. Теперь сравниваем полупространства и записываем номера зон одинаковых полу пространств из начальной конфигурации в соответствующие позиции строки генерации конечной.

Первая зона:

1(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно первый элемент строки генерации равен 1.

Вторая зона:

2(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно второй элемент строки генерации равен 1.

Третья зона:

3(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно третий элемент строки генерации равен 1.

Четвертая зона:

4(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно четвертый элемент строки генерации равен 1.

Пятая зона:

5(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно пятый элемент строки генерации равен 1.

Шестая зона:

6(-).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

1(-).

Следовательно шестой элемент строки генерации равен 1.

Седьмая зона:

7(+).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно седьмой элемент строки генерации равен 2.

Восьмая зона:

8(+).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно восьмой элемент строки генерации равен 2.

Девятая зона:

9(+).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно девятый элемент строки генерации равен 2.

Десятая зона:

10(+).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно десятый элемент строки генерации равен 2.

Одиннадцатая зона:

11(+).

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+).

Следовательно одиннадцатый элемент строки генерации равен 2.

Двенадцатая зона:

12(+)

Такому положению вещей соответствует следующая зона начальной конфигурации:

2(+)

Следовательно двенадцатый элемент строки генерации равен 2.

Получили строку вида  $(1, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2)$ .

## 4.2 Пример связывания

Покажем на примере некоторых планарных дефектов их связь через строку генерации. Для этих, тривиальных в некотором роде, видов дефектов матрицы взаимодействия совпадут с результирующими.

Базовый:

$$Conf_1 = \langle 1, 2 \rangle, \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \dot{R}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_1^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

И обратный ему:

$$Conf_2 = \langle 2, 1 \rangle, \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \dot{R}_2^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Тогда:

$$Conf_2 = Gen((2, 1), Conf_1). \quad (4.14)$$

$$Conf_1 = Gen((2, 1), Conf_2). \quad (4.15)$$

Пусть:

$$Conf_3 = \langle 1, 2, 2 \rangle, \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned}\dot{R}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_3^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.17}$$

Тогда:

$$Conf_3 = Gen((1, 2, 2), Conf_1).\tag{4.18}$$

$$Conf_3 = Gen((2, 1, 1), Conf_2).\tag{4.19}$$

$$Conf_1 = Gen((1, 2, 0), Conf_3).\tag{4.20}$$

$$Conf_2 = Gen((2, 1, 0), Conf_3).\tag{4.21}$$

Пусть:

$$Conf_4 = \langle 1, 1, 2 \rangle,\tag{4.22}$$

$$\begin{aligned}\dot{R}_4^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_4^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.23}$$

Тогда:

$$Conf_4 = Gen((1, 1, 2), Conf_1).\tag{4.24}$$

$$Conf_4 = Gen((2, 2, 1), Conf_2).\tag{4.25}$$

$$Conf_4 = Gen((1, 1, 2), Conf_3).\tag{4.26}$$

$$Conf_1 = Gen((1, 3, 0), Conf_4).\tag{4.27}$$

$$Conf_2 = Gen((3, 1, 0), Conf_4). \quad (4.28)$$

$$Conf_3 = Gen((1, 3, 3), Conf_4). \quad (4.29)$$

Пусть:

$$Conf_5 = \langle 2, 1, 1 \rangle, \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \dot{R}_5^a &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_5^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Тогда:

$$Conf_5 = Gen((2, 1, 1), Conf_1). \quad (4.32)$$

$$Conf_5 = Gen((1, 2, 2), Conf_2). \quad (4.33)$$

$$Conf_5 = Gen((2, 1, 1), Conf_3). \quad (4.34)$$

$$Conf_5 = Gen((3, 3, 1), Conf_4). \quad (4.35)$$

$$Conf_1 = Gen((2, 1, 0), Conf_5). \quad (4.36)$$

$$Conf_2 = Gen((1, 2, 0), Conf_5). \quad (4.37)$$

$$Conf_3 = Gen((2, 1, 1), Conf_5). \quad (4.38)$$

$$Conf_4 = Gen((2, 2, 1), Conf_5). \quad (4.39)$$

Пусть:

$$Conf_6 = \langle 2, 2, 1 \rangle, \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned}\dot{R}_6^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \ddot{R}_6^a &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{4.41}$$

Тогда:

$$Conf_6 = Gen((2, 2, 1), Conf_1).\tag{4.42}$$

$$Conf_6 = Gen((1, 1, 2), Conf_2).\tag{4.43}$$

$$Conf_6 = Gen((2, 2, 1), Conf_3).\tag{4.44}$$

$$Conf_6 = Gen((3, 3, 1), Conf_4).\tag{4.45}$$

$$Conf_6 = Gen((1, 1, 2), Conf_5).\tag{4.46}$$

$$Conf_1 = Gen((3, 1, 0), Conf_6).\tag{4.47}$$

$$Conf_2 = Gen((1, 3, 0), Conf_6).\tag{4.48}$$

$$Conf_3 = Gen((3, 1, 1), Conf_6).\tag{4.49}$$

$$Conf_4 = Gen((3, 3, 1), Conf_6).\tag{4.50}$$

$$Conf_5 = Gen((1, 3, 3), Conf_6).\tag{4.51}$$

Указанный пример показывает, что все представители класса взаимозаменяемы. О любом произвольном представителе класса можно судить по базовому. Какой из них является таковым? Однозначно, что это будет элемент без дополнительных плоскостей. Наиболее вероятно, что это начальный представитель из всего их множества согласно ординала. Такое положение вещей более строго выражает *Аксиома выбора* теории множеств. Генерирующая функция, связывающая матрицы взаимодействия

дефектов из одного класса через строку генерации указывает на наличие *Функции выбора* для множества всех конфигураций, соответствующих дефектам.

## 4.3 Приложения теории графов

В первой Главе отмечалась связь между комбинаторикой, как токовой и теорией множеств. Рассмотрим теперь комбинаторику, вернее такие комбинаторные конструкции, как графы применительно к комплексам планарных сверхструктурных дефектов. Весь аппарат теории графов является частью дискретной математики, а она в свою очередь базовой для всех компьютерных приложений. Занимаясь компьютерным моделированием физических задач правильным будет использование подходов данной теории. Этим самым можно заменять, в частности, некоторые алгоритмы простого перебора на «продвинутые», позволяя в большинстве случаев добиться их сходимости. Выделим несколько аспектов приложения данной теории в контексте наших задач.

### 4.3.1 Дерево как классификатор дефектов

Кажется трудно разрешимой попытка построения дерева всех комплексов планарных сверхструктурных дефектов. Сложно представить себе тривиальное условие перехода по узлам такова графа. Связи между узлами из одного класса дефектов, с привлечением строки генерации, не подразумевают операций с результирующей матрицей, либо других двухместных или одноместных. Связи между узлами из разных классов дефектов такие операции подразумевают. Например, можно было бы отобразить их разным цветом. Но приводя их все, загромождая ими схему, получим граф, который попросту говоря, утратит ясность выстраиваемых связей. Более просто устроен граф классов дефектов. Каждый его узел отображает как бы по одному такому представителю от каждого класса. Исходящим, или коренным, без сомнения, будет узел, соответствующий планарному сверхструктурному дефекту. Самый простой вариант дерева для планарных представителей КПСД показан на Рис. (??). Можем представить себе это следующим образом. Для класса, состоящего из двух параллельных плоскостей понадобятся представители из класса планарных дефектов. Этому положению вещей соответствует вертикальная стрелка из верхнего узла. При расчете матриц взаимодействия для класса, представляющего три плоскости важно знать матрицы планарного дефекта, а так же учитывать межплоскостное взаимодействие.

Видим, что для него таких стрелок две, и так далее. Получается, что на каждом последующем узле мы как бы вычлениаем из результирующей матрицы всех предыдущих. Все связи из компонента одного класса с присущей ему матрицей будут отображаться одной стрелкой.

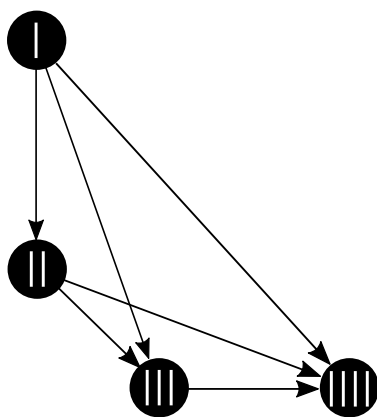


Рис. 4.2: Часть дерева классов

После операций, проделанных с результирующей в результате нашего алгоритма классификации остается матрица или матрицы для каждого закона взаимодействия, которые присущи именно этому виду взаимодействия и относят его в этот класс. Практическая ценность графа в наглядности представления составных частей комплекса. Если верно построить часть графа

в окружении искомого узла, то легко увидеть компоненты, его составляющие и ему предшествующие. По числу соединений можно судить о максимальном числе операций, необходимых для разложения результирующей матрицы. Надо понимать, что такое представление, будучи схематичным, не дает точного значения таких операций. Ведь, скажем, для того же класса, представленного параллельными плоскостями за единственной связью кроется сразу два планарных дефекта. Обозначать же каждый из них отдельной стрелкой представляется лишним. Повторю — мы тем самым просто перегрузим нашу схему, ведь, скажем, уже шесть взаимно перпендикулярных плоскостей могут породить более шестидесяти таких компонентов. Число типов компонентов при этом всего двенадцать. Матрицы, полученные в остатке, вернее сказать тот конечный тип взаимодействия для конкретного узла может служить первичным ориентировочным названием наших классов. Четырех линейное, либо восьми точечное — эти названия взаимодействия в тех частных случаях, которые приводились в издании ранее, дают представление о том, с чем мы имеем дело.

### 4.3.2 Простые графы и строение дефектов

До того, как проводить какие либо количественные расчеты частей сложного дефекта, его необходимо сформировать с помощью плоскостей. Их



пересечения зададут ребра, вершины и грани будущего объекта исследования. На данном этапе верным будет привлечение новой математической категории из комбинаторики, как области знания о графах.

Здесь очевидна существующая прямая аналогия с простым графом даже в названиях. Для фигур дефектов, топологически эквивалентных сфере, разница только в определении, названии граней таких дефектов. Здесь ближайшим аналогом из теории графов будут простые циклы. Важным будет отметить наличие самой возможности использование алгоритмов *DFS*, либо *DFS* модифицированных алгоритмов для построения некоторых элементов таких дефектов с различной топологией.

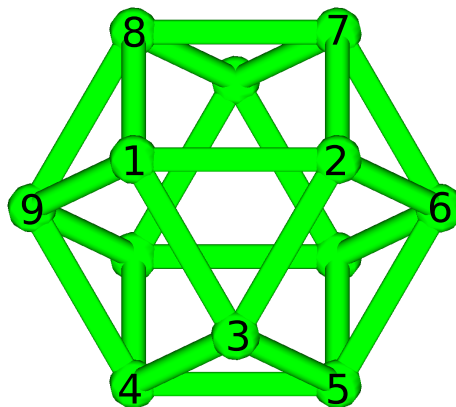


Рис. 4.3: Пример графа

### 4.3.3 Матрицы сильно связные по Форнебиусу

Удачной стороной метода взаимодействующих зон является возможность формального его описания в виде матриц. Аппарат матричных преобразований наряду с известными всем операциями или аналогичными им операторами, кроме того, содержит довольно редко используемую возможность нумерованной замены строк и столбцов исходной матрицы. Более столетия назад этот метод сильного связывания матриц был подробно изучен немецким математиком Форнебиусом применительно к некоторым квадратным матрицам. Перечислим условия, под которые должны попадать элементы сильно связных матриц. Две сильно связные матрицы должны содержать одни и те же элементы, причем одинаковые — в одинаковых количествах. Во-вторых это же условие должно выполняться отдельно для главных диагоналей. Под условия таковых попадают матрицы взаимодействия, которые являются примером физического приложения этой теории. В них присутствуют элементы трех видов — 0, -1, 1, а все элементы главной диагонали нулевые. И хотя пришлось расширить просто замену строк и столбцов их клонированием и удалением для выявления более общей связи таких матриц и соответствующих им дефектов, картина операции отображения наиболее четко

прослеживается именно для матриц одного размера. Тогда совпадение числа элементов одного знака в матрицах и возможность перевода их друг в друга простой заменой строк и столбцов дает право отнести дефекты, описываемые таким взаимодействием к одному классу. В источнике [16] рассказано, как таким матрицам поставить в соответствие полные графы Берга и согласно изоморфизму этих графов считать такие матрицы сильно подобными. Изучив данный источник становится понятным, что в данном обзоре перечислены не все отображения, присущие сложным дефектам. Теория графов, как часть дискретной математики, имеет гораздо больше приложений в любой области наук, использующих компьютерное моделирование.

## Заключение

Исследование неизвестных физических объектов или явлений как правило не влечет за собой привлечение новых математических категорий. Математическое сообщество скорее всего уже позаботилось и предоставило инструменты для такой работы. К примеру до Галилея уже умели решать квадратные уравнения — оставалось только правильно применить их к задачам на ускоренное движение тел. Эйнштейн сделал тоже самое используя аппарат, разработанный Чевитой. Исключением разве что являются работы Ньютона, разрабатывавшего теорию сил параллельно с основами анализа.

В данной работе более скрупулезно дается определение комплексов планарных сверхструктурных дефектов исходя из теории множеств. Давая определение дефекта априори соприкасаешься с категориями бесконечного. Оперлируя подстановками и перестановками, рассчитывая число сочетаний комбинаторных конфигураций дефекта непременно сталкиваешься с основами теории, ее теоремами и следствиями.

Появление этого раздела математики изменило взгляд на саму науку. Ученые, интуитивно оперирующие категориями неизведанного — интуисты стали серьезно восприниматься сообществом. Но законы логики никто не отменял. Соединившись, эти два этих метода познания материального мира помогли в дальнейшем обосновать и разрешить квантовые парадоксы. Парадоксы же теории множеств до сих пор остаются неразрешенными. Интересен был вопрос — существуют ли множества с мощностями, расположенными между счетными множествами и множествами континуальными? *Аксиома выбора* не могла ответить на поставленный вопрос, пока не была предложена альтернативная *Аксиома детерминированности*, которая однозначно исключает такую возможность. Может быть ответы на другие вопросы теории кроются не в общих, сугубо математических рассуждениях, а в рассмотрении конкретных объектов? В качестве таковых выбраны множества в определении КПСД.

Зачем вообще понадобилось выделять компоненты, расчленять комплексы планарных сверхструктурных дефектов? Потребность в такой

классификации появилась из за различия описания взаимодействия даже для тех дефектов, у которых совпадают плоскости, их формирующие, результирующие матрицы аналогичны, а вот набор компонентов получается разный. К комплексам планарных сверхструктурных дефектов относятся объекты в кристаллах, отвечающие некоторому набору условий. Перечислим их.

Требуется сама сверхструктура с набором представлений. Они дефект и порождают в том смысле, что смена сортов атомов в соответствующих положениях кристаллической решетки при прохождении через плоскости дефекта дает число и тип изменившихся связей. Порядок нумерации представлений в этом наборе не суть важен, главное что бы он был. К этому набору привязаны законы взаимодействия. Хотя прямой и обратный законы взаимодействия несомненно обладают сродством, но их рассмотрение по отдельности позволяет минимизировать число аксиом и алгоритмов метода, представленного в издании. Если же брать в расчет еще и законы, учитывающие взаимодействие представлений самих с собой, то энергия дефектов такого вида все равно будет нулевой. Как говорится — лишние хлопоты. Элементарная ячейка сверхструктуры задает базис с системой координат, не обязательно прямоугольной и ортонормированной. В этой системе координат определяют плоскости, формирующие дефект. Трудно представить себе все многообразие КПСД. Но если отталкиваться от всего множества дефектов, как было показано, бесконечного как континуум, такие плоскости составляют все таки счетное множество. Вкупе с ординалом получаем четкий порядок их перебора. Не все такие плоскости подходят для формирования дефектов. Они медиальные относительно позиции соседних атомов, то есть не содержат таковых. Бывают двух типов. Плоскости первого типа формируют дефект. Убирая такую плоскость мы, скажем, из планарного сверхструктурного дефекта получаем идеальный кристалл. Кардинально меняется сама задача. Плоскости второго типа дополнительные. Убирая такую плоскость дефект не трансформируется. Часто к такой операции прибегают чтобы уравнять число зон двух дефектов из одного класса. Так же, исходя из показанной выше проблемы соответствия, плоскости должны формировать, создавать непустые зоны. Наконец, мы перешли к зонам, уже упомянутым при рассмотрении плоскостей. Не случайно приходится говорить о плоскостях и упоминать при этом зоны ими формируемые. Или упоминать представления сверхструктуры в контексте плоскостей, порождающих дефекты. Эти категории переплетены между собой во едино при рассмотрении комплексов планарных сверхструктурных дефектов. Зоны это вообще ключевая категория. Именно их, а не атомы, понадобилось рассмотреть как при определении КПСД, так и при рас-

чете его энергии. Их много, но не так много, как самих дефектов. Все дело в учете только невырожденных и непустых зон. А множество таких бесконечно, но счетно. То, как зоны взаимодействуют между собой удастся описать матрицами. Для них даже вводится отдельное название — матрицы взаимодействия. Их получение и сопутствующие операции над ними были подробно рассмотрены по ходу работы. В издании использовано два способа записи матриц. Первый способ — классический в виде таблицы. Второй способ — в виде троек целых чисел, что соответствует матрице без «вакуума». Логические операции над матрицами вводились на основании того, что они описывают все таки зоны, а не абстрактные понятия. Их, зоны, можно убрать из рассмотрения или оставить согласно адьюнкции или дизьюнкции. И, соблюдая правила такой логики, получить тот набор инструментов, достаточный на этот момент для разложения комплексов на элементы. На данном этапе пропадает различие между компонентами. И для линейных и для планарных и для точечных применимы одни и те же алгоритмы. Такая формализация при этом не валит все в одну кучу. Набор компонентов относит дефект к одному, строго определенному классу. Хотелось бы отметить следующий момент. Практика работы с матрицами взаимодействия показывает, что элемент матрицы это либо 0, 1 либо  $-1$ . Если при операциях с матрицами получается другое значение, то это либо ошибка, либо разложение на компоненты было не полным. Ну а строка генерации — это мостик между дефектами из одного класса. Связанные этой строкой через матрицы, дефекты по сути классифицируются по способу расчета энергии. И становится не важным, модель ли это парных связей, или любая другая многочастичная парадигма. Матрицы взаимодействия при этом не изменятся. Автору кажется такой результат объективным, да и модель взаимодействующих зон, как я считаю имеет право на существование. Не будем требовать от нее большей всеобщности чем, скажем, квантовая теория. По сути метод взаимодействующих зон адекватно работает именно над объектами порядка более или одного объема ячейки кристаллической решетки. Слишком большие объекты ограничены объемом блока порядка миллиона атомов. Более крупные блоки персональному компьютеру просто не одолеть. Объекты меньшего размера требуют учета квантовых эффектов. Осталось без рассмотрения множество, элементами которого является один представитель от каждого класса дефектов. Какова его мощность? Оставим вопрос открытым.

Что еще можно отметить по поводу названия третьего Тома? К этапам эволюции в полной мере относятся все задачи из второго Тома. А что это еще как не этапы? Ведь исключив механизмы и, самое главное, время протекания процесса можно с определенной долей вероятности

встретить дефект по форме эквивалентный любой из рассмотренных там фигур Платона и Архимеда. Емкое, и в тоже время лаконичное определение целого ряда превращений в кристалле.

Самым слабым местом теории является запрет релаксации атомов дефекта. Она, релаксация, сводит на нет все допущения данного определения. Ведь все держится на плоскостях, а они, как известно для евклидова пространства не деформируемые. В то же время этот подход позволяет представить все в следующем виде. Механический аналог решетки это массы на пружинах. Колебания центров атомов нам не важны. Собственно не важны и соответствующие им массы — их мы убираем. А вот жесткость пружин, заменивших в таком представлении соответствующие им связям оставляем. Тогда то сопротивление смещению в результате преобразования, замены связей, которое почувствует на себе остов кристаллической решетки вблизи дефекта будет определять силы и, как следствие, энергию комплекса. Такая приближительная модель и будет выражать существо подхода.

Другим слабым местом изложенного являются сами потенциалы, в частности потенциалы Морза. Каким должен быть радиус обрезания потенциала? Достаточным будет захват не менее ста так называемых ближайших сфер у атома. В работе учитывалось только четырнадцать, чтобы рассмотреть общую картину выше изложенного. В противном случае работу вряд ли удалось закончить в среднесрочной перспективе, учитывая вычислительные мощности, доступные автору.

И еще один нюанс. Вольно или невольно мы заложники того времени и того окружения в котором пребываем. Развитие компьютерных наук позволило значительно расширить круг решаемых с их помощью проблем. Проблема же самих этих наук в отсутствии канона. Мы наблюдаем бурное развитие информационных технологий. При этом слишком разные философии у пользователей программного обеспечения. Это затрагивает как ОС, так и язык, выбранный для кодирования, СУБД для хранения промежуточных результатов, графические редакторы, использование макропрограммирования. Ведь при неверной ориентации в этих вопросах могут появиться и чисто юридические проблемы. Автору импонирует философия Open Source, его открытость и дружелюбие, в полной мере отвечающее идее открытого обмена информацией.

# Литература

- [1] Дмитриев С. В., Старостенков М. Д., Жданов А. Н. Основы кристаллогеометрического анализа дефектов в металлах и сплавах. Учебное пособие для вузов / Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова. — Барнаул: Издательство АлтГТУ, 1995. — 256 с.
- [2] Гуртов В. А., Осауленко Р. Н. Физика твердого тела для инженеров. Учебное пособие. — 2-е изд. — М.: Техносфера, 2012. — 560 с.
- [3] Гетманова А. Д. Учебник по логике. — 2-е изд. — М.: ВЛАДОС, 1995. — 303 с.
- [4] Ерош И. Л. Дискретная математика. Комбинаторика. Учебное пособие. — СПб.: ГУАП, 2001. — 37 с.
- [5] Александров П. С. Лекции по аналитической геометрии. — М.: Наука, 1968. — 912 с.
- [6] Фрид Э. Элементарное введение в абстрактную алгебру. Перевод с венгерского Ю. А. Данилова. — М.: Мир, 1979. — 260 с.
- [7] Фролов А. М. Энергия сложных дефектов. Том 1. Математический аппарат. — Барнаул: Пять плюс, 2016. — 192 с., ил.
- [8] Фролов А. М. Энергия сложных дефектов. Том 2. Атлас тел Платона и Архимеда. — Барнаул: Си-пресс, 2018. — 188 с., ил.
- [9] Уэрт Ч., Томсон Р. Физика твердого тела. Перевод с английского А. С. Пахомова., Б. Д. Сумма; Под редакцией С. В. Тябликова. — М.: Мир, 1966. — 567 с.
- [10] Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. Учебное пособие. — 2-е издание, переработанное — М.: Наука, 1979. — 640 с.

- [11] Курант Р., Роббинс Г. Что такое математика? — 3-е издание исправленное и дополненное — М.: МЦНМО, 2001. — 568 с.
- [12] Иванов В.А., Рабинович А.Л., Хохлов А.Р. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. — 696 с.: цв. вкл.
- [13] Шлее М. Qt 5.3. Профессиональное программирование на C++. — СПб.: БХВ-Петербург, 2016. — 928 с.: ил.
- [14] Медведев Н.Н, Старостенков М.Д, Потекаев А.И, Захаров П.В, Маркидонов А.В, Еремин А.М, . Изв. вузов. Физика 57, 3, 92 (2014).
- [15] Каплан И.Г. Молекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. пер. с англ. — М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. — 394 с: ил.
- [16] Зыков А.А. Основы теории графов. — М.:Вузовская книга, 2004. — 664 с: ил.



# Список иллюстраций

1	Биекция . . . . .	6
2	Инъекция . . . . .	6
3	Суръекция . . . . .	6
4	Аксиома выбора . . . . .	6
1.1	Левый запрет . . . . .	16
1.2	Разрешено . . . . .	16
1.3	Правый запрет . . . . .	16
1.4	Набор 100 . . . . .	20
1.5	Набор 110 . . . . .	20
1.6	Набор 120 . . . . .	20
2.2	Энергия — функция сдвига . . . . .	105
2.3	Первая производная . . . . .	106
2.4	Модули сдвига . . . . .	107
2.1	Набор КПСД DDDDD . . . . .	109
3.1	Схема трансформации . . . . .	112
3.2	Исходная конфигурация . . . . .	119
3.3	Конечная конфигурация . . . . .	119
3.4	Атомы у ядра исходной конфигурации в плане . . . . .	124
3.5	Атомы у ядра исходной конфигурации в плане. Продолжение	125
3.6	График №1 - {1,2,3,4} . . . . .	126
3.7	График №2 - {1,2,4,3} . . . . .	126
3.8	График №3 - {1,3,2,4} . . . . .	127
3.9	График №4 - {1,3,4,2} . . . . .	127
3.10	График №5 - {1,4,2,3} . . . . .	128
3.11	График №6 - {1,4,3,2} . . . . .	128
3.12	График №7 - {2,1,3,4} . . . . .	129
3.13	График №8 - {2,1,4,3} . . . . .	129
3.14	График №9 - {2,3,1,4} . . . . .	130
3.15	График №10 - {2,3,4,1} . . . . .	130

3.16	График №11 - {2,4,1,3}	131
3.17	График №12 - {2,4,3,1}	131
3.18	График №13 - {3,1,2,4}	132
3.19	График №14 - {3,1,4,2}	132
3.20	График №15 - {3,2,1,4}	133
3.21	График №16 - {3,2,4,1}	133
3.22	График №17 - {3,4,1,2}	134
3.23	График №18 - {3,4,2,1}	134
3.24	График №19 - {4,1,2,3}	135
3.25	График №20 - {4,1,3,2}	135
3.26	График №21 - {4,2,1,3}	136
3.27	График №22 - {4,2,3,1}	136
3.28	График №23 - {4,3,1,2}	137
3.29	График №24 - {4,3,2,1}	137
3.30	Нестабильная, эволюционирующая конфигурация	138
4.1	Схема связывания	145
4.2	Часть дерева классов	166
4.3	Пример графа	167

# Энергия сложных дефектов. Том 3. Деформация. Этапы трансформации

© А. М. Фролов, 2020

Подписано в печать 10.02.2020  
Гарнитура Computer modern LaTeX  
Бумага офсетная. Цифровая печать.  
Усл.п.л 21,24. Тираж 50 экз. Заказ №48.

Издательство Дмитрия Петрова  
656000, Алтайский край, г. Барнаул,  
пр. Социалистический, 109, оф. 217  
Тел.: +7 (3852) 717-034  
E-mail: 717034@mail.ru  
tipografiya-barnaul.ru