

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ФУЛЛЕРЕНОПОДОБНЫХ СТРУКТУР МЕТОДОМ ПРОЕКЦИРОВАНИЯ МНОГОМЕРНЫХ РЕГУЛЯРНЫХ РЕШЕТОК

Лиопо В. А., Сабуть А. В.

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы,
г. Гродно, Беларусь liopo@grsu. grodno. by

Группа точечной симметрии n -мерной регулярной решетки Q изоморфна группе $GL_n(Z, G)$ целочисленных унимодулярных матриц N , удовлетворяющих соотношению:

$$N^T G N = G, \quad (1)$$

где G - матрица Грама решетки Q [1]. Любая матрица $N \in GL_n(Z, G)$ диагонализуема, и ее характеристический многочлен равен произведению многочленов деления круга [2]:

$$\Delta(\lambda) = \det(\lambda E - N) = \Phi_{m_1}^{\gamma_1}(\lambda) \cdot \Phi_{m_2}^{\gamma_2}(\lambda) \cdot \dots \cdot \Phi_{m_s}^{\gamma_s}(\lambda) \quad (2)$$

где $y_1 \phi(\tau_1) + y_2 \phi(\tau_2) + \dots + y^{\text{cp}} \phi(\tau_s) = p$; (p - функция Эйлера.*

Каждая циклическая подгруппа $\{n, N^2, \dots, N^{p-1}, N^p\}$ соответствует некоторому элементу симметрии (ЭС) решетки Q . В зависимости от корней многочлена (2) этот ЭС будем относить к определенному классу, который обозначим символом:

$$\langle m_1^{\gamma_1} m_2^{\gamma_2} \dots m_s^{\gamma_s} \rangle \quad (3)$$

Порядок ЭС класса (3) равен наименьшему общему кратному чисел $m_1, m_2, \dots, m_s$. Из многочленов деления круга $\Phi(\lambda)$, таких, что $\varphi(s) < p$, мы можем составить характеристические многочлены (2) степени p , тем самым будут определены все классы ЭС в n -мерном евклидовом пространстве.

Для нахождения матрицы Грама G_0 регулярной решётки Q_0 , имеющей ЭС класса (3), многочлен (2) запишем в виде:

$$D^{\wedge \wedge} B^{\wedge} K \cdot -^{\wedge} O O \quad (4)$$

где каждый из множителей равен произведению попарно различных многочленов деления круга. В соответствии с разделением (4) составим квазидиагональную матрицу

$$N_0 = \text{diag} \{J_1, J_2, \dots, J_T\}_5$$

клетки J_k которой - сопровождающие матрицы для множителей $\forall_k(A)$, $k = 1, 2, \dots, T$; а также квазидиагональную матрицу

$$R = \text{diag} \{R_1, R_2, \dots, R_T\}_9$$

где клетки R^* - составлены из собственных векторов матриц J_k , $k = 1, 2, \dots, x$. Тогда матрица Грама решетки Q_0 имеет вид:

$$G_0 = \tilde{R}^* H R^{\wedge} \quad /54$$

где $R = \det(R) \cdot R^{-1}$; H - невырожденная матрица, перестановочная с $L = \text{diag} \{X_1, X_2, \dots, X_n\}$, $X_2, \dots, A^*$ - корни многочлена (2). Поскольку $N_0^T G_0 N_0 = G_0$, **И** характеристический многочлен матрицы N_0 совпадает с (2), то решетка Q_0 имеет ЭС класса (3).

Таким образом, по формуле (5) мы можем находить матрицы Грама n -мерных регулярных решеток с заданными ЭС. Например, для четырехмерных регулярных решеток, имеющих ЭС 5-го порядка, матрица Грама следующая:

$$G_0 = \begin{pmatrix} 2v & v+u & u & -u \\ v+u & 2v & v+u & u \\ u & v+u & 2v & v+u \\ -u & u & v+u & 2v \end{pmatrix}_5$$

где u , v - произвольные числа, удовлетворяющие неравенствам:

$$v > \frac{\sqrt{5}+1}{2}u, \quad v > -\frac{\sqrt{5}-1}{2}u.$$

Нами были исследованы трехмерные проекции правильных систем точек относительно групп точечной симметрии многомерных решеток с ЭС пятого и других некристаллографических порядков. Некоторые из полученных проекций являются полиэдрами с некристаллографической симметрией граней, что позволяет их считать моделями фуллереноподобных структур.

Литература:

1. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы: В 2-х т. - М.: Мир, 1990. - 791 с.
2. Лиопо В. А., Сабуть А. В. Кристаллографические классы и формула симметрии регулярных решеток в многомерных евклидовых пространствах // Вестник ГрГУ-2001 - Сер. 2. - № 1(5).-С.3-15.