

ФУЛЛЕРЕНОПОДОБНЫЕ ПОЛИЭДРЫ В ТРЕХМЕРНЫХ ОБОБЩЕННЫХ РЕШЕТКАХ

Сабуць А.В., Лиопо В.А.

Учреждение образования «Гродненский
государственный университет имени Янки Купалы»
230023, Беларусь, г.Гродно, ул. Ожешко, 22.

E-mail: sabutz@mail.grsu.grodno.by, liopo@grsu.by

В конце XX века были обнаружены вещества с некристаллографической симметрией, такие как квазикристаллы и фуллерены. Наличие осей 5 противоречит решеточной симметрии, но в то же время дифракция электронов и рентгеновских лучей на этих объектах была получена экспериментально. Следовательно, встал вопрос о более общих подходах к исследованию решеточных структур, в которых возможны оси симметрии, отсутствующие в кристаллах. Понятие кристаллической решетки необходимо расширить представлениями об обобщенных регулярных решетках (ОРР). Их можно рассматривать как множество точек евклидова пространства, кристаллографические координаты которых являются числами вида $a + \tau \cdot b$, где a и b – целые числа, $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ – “золотое отношение” [1]. ОРР представляют собой всюду плотные множества точек и могут иметь пента- и декагональную симметрию в евклидовых пространствах с размерностями $n \geq 2$. Из двумерных ОРР с пентагональной симметрией можно выделить в качестве дискретных подрешеток различные периодические структуры, известные как сетки Пенроуза. При $n = 3$ возникают трехмерные аналоги сеток Пенроуза. Кроме 32 кристаллографических групп точечной симметрии, для ОРР существуют еще 14 некристаллографических. Например, группа для оси 5-го порядка в целочисленном представлении может быть записана в виде:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -\tau \\ 0 & 1 & \tau \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & \tau \\ 0 & -\tau & -\tau \\ 1 & \tau & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \tau & 1 \\ -\tau & -\tau & 0 \\ \tau & 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \tau & 1 & 0 \\ -\tau & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В евклидовом пространстве ОРР однозначно задается матрицей Грама $G = (\bar{a}_i \cdot \bar{a}_j)$, где $\{\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3\}$ – кристаллографический базис. Матрицы Грама трехмерных ОРР с пентагональной симметрией имеют вид [2]:

$$G = N^T \cdot \begin{pmatrix} 2v + \tau u & 2u + \tau v & v + u + \tau u \\ 2u + \tau v & 2v + \tau u & 2u + \tau v \\ v + u + \tau u & 2u + \tau v & 2v + \tau u \end{pmatrix} \cdot N,$$

где u, v – произвольные вещественные числа, удовлетворяющие неравенствам $v > u$ и $v > -3u/2$; N – произвольная целочисленная унимодулярная (3×3) -матрица. В трехмерном пространстве существует 5 различных ОРР с максимальной группой точечной симметрии $m\bar{5}m$ порядка 120. Матрицы Грама этих решеток следующие:

$$\begin{pmatrix} 2 & \tau & 1 \\ \tau & 2 & \tau \\ 1 & \tau & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 - \tau & \tau & \tau - 1 \\ \tau & 3 & \tau \\ \tau - 1 & \tau & 3 - \tau \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 1 - \tau & 1 - \tau \\ 1 - \tau & 2 & 1 - \tau \\ 1 - \tau & 1 - \tau & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 5 & 2\tau - 1 & 2\tau - 1 \\ 2\tau - 1 & 5 & 2\tau - 1 \\ 2\tau - 1 & 2\tau - 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Группа $m\bar{5}m$ содержит подгруппы следующих некристаллографических классов (в скобках указаны порядки подгрупп):

$m5m$ (120), 532 (60), $\overline{10}m2$ (20), $5m$ (10), 52 (10), $\overline{10}$ (10), 5 (5).

Матрицы Грама трехмерных ОРР с декагональной симметрией имеют вид:

$$G = N^T \cdot \begin{pmatrix} 2v+u-\tau u & v+2u-\tau v & v+2u-\tau u \\ v+2u-\tau v & 2v+u-\tau u & v+2u-\tau v \\ v+2u-\tau u & v+2u-\tau v & 2v+u-\tau u \end{pmatrix} \cdot N,$$

где u , v – произвольные вещественные числа, удовлетворяющие неравенствам $v > u$ и $v > -3u/2$; N – произвольная целочисленная унимодулярная (3×3) -матрица. Максимальная группа точечной симметрии $10/mmm$ порядка 40 содержит подгруппы следующих некристаллографических классов (в скобках указаны порядки подгрупп):

$10/mmm$ (40), $10mm$ (20), $\overline{5}2m$ (20), 10.22 (20), $10/m$ (20), 10 (10), $\overline{5}$ (10).

Координационные полиэдры ОРР с группой $m5m$ имеют икосаэдрическую симметрию, среди них имеется усеченный икосаэдр (или модель фуллерена C_{60}) [3, 4]. Отсюда можно сделать предположение, что углеродные наночастицы могут образовывать формы и других координационных полиэдров обобщенных решеток. На рисунках 1 – 4 приведены примеры моделей фуллеренов C_{60} , C_{72} , C_{80} , C_{120} , C_{132} и C_{140} .

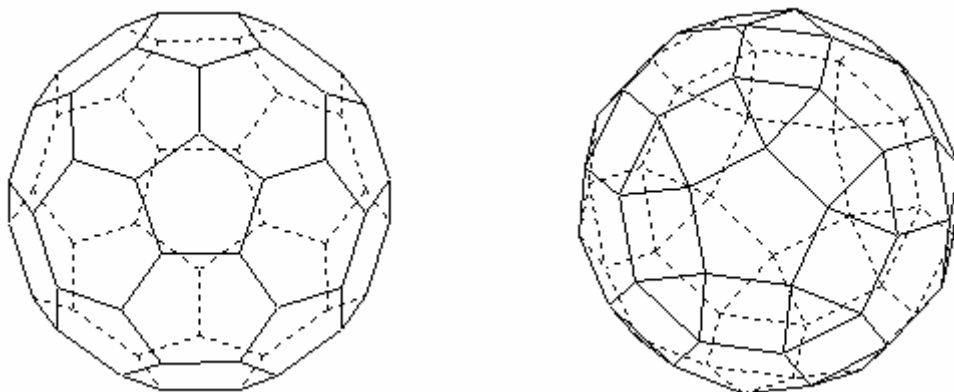


Рис.1. Модели фуллеренов C_{60} .

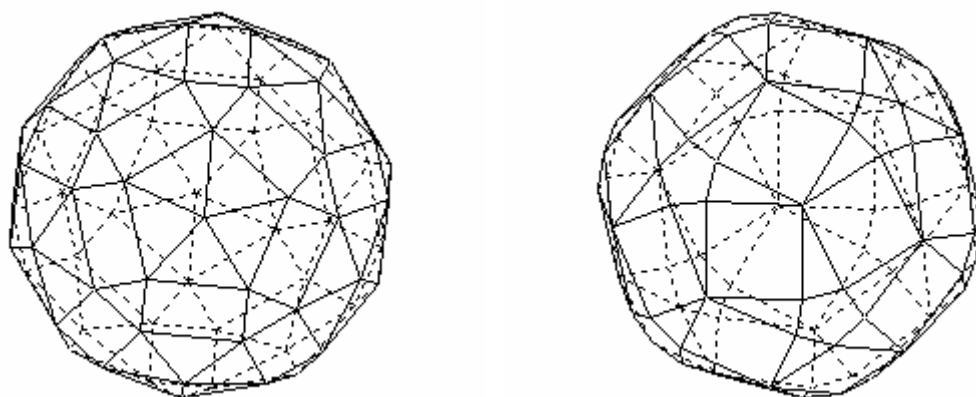


Рис.2. Модели фуллеренов C_{72} и C_{80} .

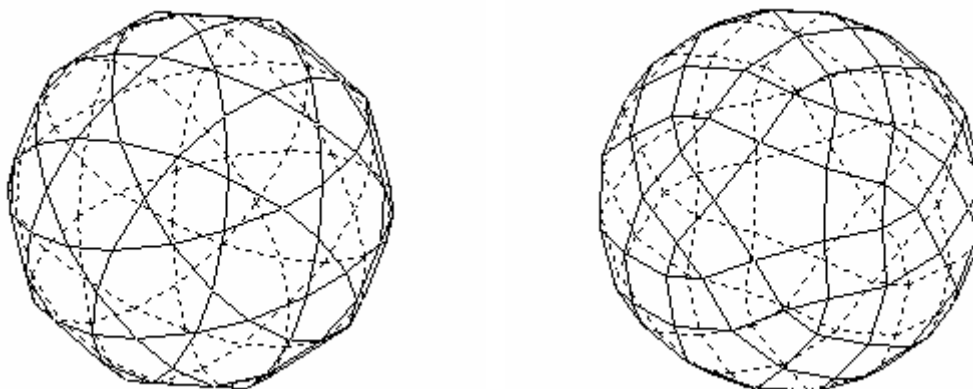


Рис.3. Модели фуллеренов C_{120} .

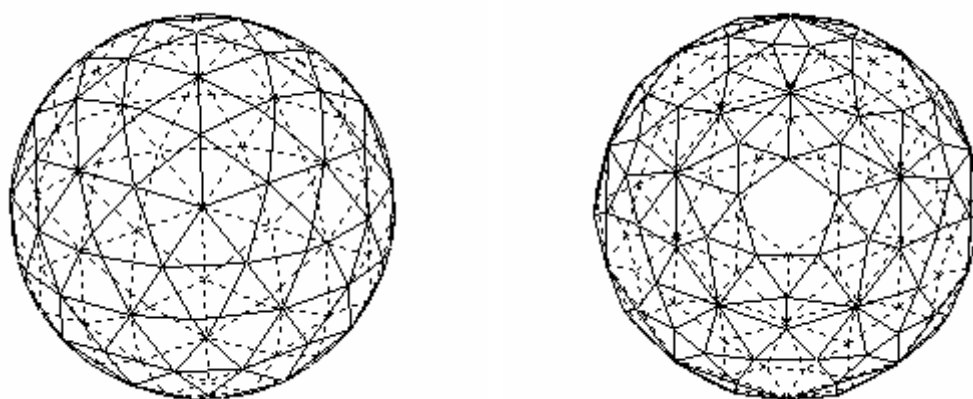


Рис.4. Модели фуллеренов C_{132} и C_{140} .

Таким образом, представления об обобщенных регулярных решетках позволяют описать структуру квазикристаллов и фуллеренов методами классической кристаллографии и могут быть использованы для анализа таких структур как нанокристаллы.

Данная работа выполнена в рамках Республиканской программы «Кристаллофизика-12», тема А34-01.

Литература:

1. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. – В 2-х томах. – М.: Мир, 1990. – 791 с.
2. Лиопо В.А., Сабуть А.В. // Вестник ГрГУ. – Сер. 2. – 2002. – № 2. – С.57–65.
3. Фуллерены и фуллереносодержащие материалы: Сборник научных трудов / Ред. акад. П.А. Витязь. – Минск: БГУ. – 2001 – 190 с.
4. Фуллерены и фуллереноподобные структуры в конденсированных средах / Ред. акад. П.А. Витязь. – Минск: БГУ. – 2002 – 224 с.