Весці БДПУ. Серыя 3. 2021. № 2. С. 20–25.

УДК 538.9

ГЕКСАГОНАЛЬНОСТЬ 4D-КУБИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ГРУПП ПОДСТАНОВОК

UDC 538.9

HEXAGONALITY OF 4D-CUBIC GRIDS IN PRESENTATION OF GROUPS OF SUBSTITUTIONS

В. А. Лиопо,
доктор физико-математических наук, профессор, «Гродненский государственный университет имени Янки Купалы;

И. А. Лявшук,
магистр природоведческих наук, старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий, Гродненского государственного университета имени Янки Купалы;

А. В. Сабуть,
кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры теоретической физики и теплотехники Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

V. Liopo,
Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Grodno State University named after Yanka Kupala;

I. Liaushuk,
Senior Teacher of the Department of Information Systems and Technologies, Master of Natural Studies, Grodno State University named after Yanka Kupala;

A. Sabut,
PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Theoretical Physics and Heat Engineering, Grodno State University named after Yanka Kupala

Поступила в редакцию 14.12.20.

Received on 14.12.20.

Цель исследования – анализ соотношений группа – подгруппа для точечных симметрий четырехмерной кубической решетки к точечным группам кристаллов. Объект исследования – точечная симметрия четырехмерного куба в представлении групп подстановок.

В основной части работы определено наличие в четырехмерной кубической решетке осей с порядками 2, 3, 4, 6. Проанализировано взаимодействие четырехмерных осей 6 друг с другом. Определено наличие осей 4 в симметрии четырехмерного куба. Описаны связи между точечными группами четырехмерного куба и группами кристаллических решеток. Описан переход от матрицы-генератора группы 6 четырехмерного куба к матрице группы 6 трехмерной кубической решетки. Материалы, изложенные в статье, могут быть использованы в области кристаллофизики и в целом в физике конденсированного состояния.

Ключевые слова: четырехмерный куб (4*МК*), точечная симметрия (4*МК*), группы подстановок, кристаллографические точечные группы, подгруппы точечных групп (4*МК*).

The objective of the research is the analysis of correlation group-subgroup for point symmetries of four-dimensional cubic grids to point groups of crystals. The object of the research is the point symmetry of four-dimensional cube in presentation of groups of substitutions.

In the main part of work presence in four-dimensional cubic grid of axes with orders 2, 3, 4, 6 is defined. The paper analyzes the interaction of four-dimensional axes 6 with each other. It defines the presence of axes 4 in symmetry of four-dimensional cube. It describes the connections between point groups of four-dimensional cube and groups of crystal grids. It describes the transition from the matrix-generator of the group 6 of four-dimensional cube to the matrix of the group 6 of three-dimensional cubic grid. The materials presented in the article can be used in the sphere of crystallography and in physics of condensed state in general.

Keywords: four-dimensional cube, point symmetry, groups of substitutions, crystallographic point groups, subgroups of point groups.

Введение. Гексагональная плотнейшая упаковка (*ГПУ*) представляет собой модель структуры кристалла, в котором атомы рассматриваются как жесткие сферы с плотнейшей упаковкой в плоской сетке. На эту атомную (шаровую) плоскую сетку накладывается такая же атомная сетка, но ее атомы (шары) находятся в лунках трех шаров нижнего слоя. Третий слой идентичен первому и расстояние между ними равно $4\sqrt{6}/3r$, где r – радиус атома (шара). Ячейка *ГПУ* имеет параметры $a = b \neq c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ (или 60°). Это общепринятое описание *ГПУ* ячейки достаточно противоречиво. Во-первых, голоэдрия гексагональной решетки это группа 6/*mmm*. В *ГПУ* точечная группа $\bar{6}m2$, так как ось 6 в *ГПУ* отсутствует. Во-вторых, в гексагональной сингонии имеется только *P*-ячейка Браве, но в ней имеются 2 одинаковых атома, тогда как в *P*-ячейке Браве не может быть двух гомологичных точек. В-третьих, атомы в *ГПУ* формируют тетраэдры, то есть при выборе одного из них в качестве начального, три ближайших к нему атома – ребра тетраэдра – могут быть взяты как репер Браве. В этом случае $a = b = c = 2r, \alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$. Однако на этом базисе построить параллелепипед невозможно. В-четвертых, в гексагональной ячейке два известных линейных параметра $a = b, c$. В ячейке *ГПУ* только один, так как $c = 2\sqrt{6}\,/\,3a$. В *ГПУ* последовательность атомных слоев имеет вид: …*ABAB*… Через каждые два слоя (*AB* или *BA*) в кристалле проходит плоскость двойникования, что и приводит к указанным особенностям. Все это, на наш взгляд, вызывает необходимость дополнительного изучения *ГПУ*-системы, например, с позиции изучения связи ее точечной симметрии с решетками более высоких размерностей.

Матрицы-генераторы точечных групп кристаллических решеток всех сингоний, кроме гексагональных, в качестве своих элементов имеют 0 и ±1, причем +1 или –1 встречается в каждой строке и в каждом столбце только один раз, что позволяет, наряду с матричным представлением таких групп, применять представление этих групп группами подстановок [1, 2].

$$4_z = \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{2} & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, m_x = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, 2_y = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

В матрицах Эйлера, которые описывают точечные преобразования в декартовом пространстве, фигурируют косинусы углов между исходным и после точечного движения положениями координатных осей, причем после движения координатные оси либо переходят друг в друга, либо остаются неподвижными. Если матрицы Эйлера включают только 0 и ±1 в качестве элементов, в одной строке или в одном столбце кубических кристаллов ±1 встречается обязательно, но только один раз.

У гексагональных решеток определяющим элементом (таксоном) точечной группы является ось 6 или $\bar{6}$. Конгруэнтность описывается матрицами, в которых фигурируют косинусы углов, кратные 60°. Для тригональных кристаллов – кратные углам 120°. Тригональные кристаллы описываются точечными группами, являющимися подгруппами групп гексагональных решеток. Матрицы точечных преобразований содержат в качестве элементов числа, отличные от единицы. Это величины $\pm 1/2, \pm\frac{\sqrt{3}}{2}$. Если имеются группы с матрицами 4 x 4, изоморфные группам 6x6 с элементами 0, ±1, то гексагональные решетки можно рассматривать как трехмерные проекции 4*D*-кубов.

Свойства точечных симметрий гексагональных решеток. Ячейка гексагональной решетки описывается параметрами $a = b, c; \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ.$ Следовательно, основанием ячейки является параллелограмм с углами 120° и 60°, то есть начало координат можно выбрать и в вершине острого угла. Для матричного представления точечной группы в кристаллофизическом базисе выбор начала координат не имеет значения, важно, чтобы начало координат при выполнении операций симметрии не меняло своего положения (название «точечные группы») [1, 2]. Матрицы-генераторы осей 6 и $\bar{6}$ имеют вид:

$$\text{ось } 6 \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \text{ось } \bar{6} \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}. \quad (1)$$

При переходе к *кг*-базису матрицы-генераторы групп 6 и $\bar{6}$ зависят от выбора угла γ [3].

Для $\gamma = 120^\circ$ поворот вокруг оси 6 и $\bar{6}$: $6 \Rightarrow \begin{vmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \bar{6} \Rightarrow \begin{vmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix}.$

Если $\gamma = 60^\circ$, то $6 \Rightarrow \begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \bar{6} \Rightarrow \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix}.$

Переход от матрицы-генератора группы $6_{кг}$ (в *кг*-системе) к матрице-генератору этой группы в *кф*-системе – $6_{кф}$ выполняется по формуле: $6_{кф} = m6_{кг}$. Обратный переход от *кф*-системы координат к *кг*-системе:

$$6_{кг} = m^{-1}6_{кф}, \text{ где } m = \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1-\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1+\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; m^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{1+\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}-1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Все группы, на основе приведенных матриц-генераторов (m_1), изоморфные и описываются матрицами Кэли вида (таблица 1) [4–6].

Таблица 1. **– Матрица Кэли групп (± 6), m_1^6 = e**

	$m_1^6 = e$	m_1	m_1^2	m_1^3	m_1^4	m_1^5
$m_1^6 = e$	e	m_1	m_1^2	m_1^3	m_1^4	m_1^5
m_1	m_1	m_1^2	m_1^3	m_1^4	m_1^5	e
m_1^2	m_1^2	m_1^3	m_1^4	m_1^5	e	m_1
m_1^3	m_1^3	m_1^4	m_1^5	e	m_1	m_1^2
m_1^4	m_1^4	m_1^5	e	m_1	m_1^2	m_1^3
m_1^5	m_1^5	e	m_1	m_1^2	m_1^3	m_1^4

Оси 6 в 4D-кубе. В трехмерном кубе по направлению [111] проходит ось 3, повороты вокруг которой описываются группой 3.

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \tag{2}$$

Преобразование матрицы-генератора группы 3:

$$\begin{vmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \tag{3}$$

где левая матрица – матрица точечного преобразования. Группа 3 в представлении группы подстановок имеет вид:

$$3_{[111]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Рассмотрим четырехмерный куб с ребрами вдоль координатных взаимно перпендикулярных осей *xyzf*. Оси *xyz* лежат в одной 3*D*-гиперплоскости. Ось 3, которая переводит оси *xyz* друг в друга, еще и перпендикулярна оси *f*. При каждом повороте ось *f* меняет свое направление. Матрица-генератор поворотов вокруг этой оси имеет вид: $\begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} = m_1$.

Группа поворотов вокруг рассмотренной оси может быть представлена в виде:

$$\begin{matrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (5)$$

На базе матрицы-генератора группы $3_{[111]} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ строятся матрицы генераторы групп 6_{4D}: $\begin{pmatrix} 4 & 1 & \bar{3} & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix};\begin{pmatrix} 4 & \bar{2} & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix};\begin{pmatrix} \bar{1} & 4 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$. Точечные преобразования, соответствующие инверсионным поворотам в 3*D*-пространстве, в 4*D*-пространстве на базе 3*D*-оси 3 имеют вид:

$$\begin{pmatrix} \bar{3} & \bar{1} & \bar{2} & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & \bar{1} & \bar{3} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & \bar{2} & \bar{1} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{4} & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (6)$$

Методика позволяет определить матрицы-генераторы групп 6_{4D} и $\bar{6}_{4D}$, построенные на основе матриц-генераторов 3_{3D} кубической решетки.

На основе: $\begin{pmatrix} \bar{3} & 1 & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ определить оси 6_{4D} и $\bar{6}_{4D}$:

$$6_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{3} & 1 & \bar{2} & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & 1 & \bar{3} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & \bar{2} & 1 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{4} & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\bar{6}_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & 2 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{1} & \bar{3} & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{2} & \bar{1} & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & 4 & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (8)$$

На основе: $\begin{pmatrix} \bar{3} & \bar{1} & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ определить оси 6_{4D} и $\bar{6}_{4D}$:

$$6_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{3} & \bar{1} & 2 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & 1 & \bar{3} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & \bar{2} & 1 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{4} & 2 & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\bar{6}_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 1 & \bar{2} & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{1} & \bar{3} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{2} & \bar{1} & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & 4 & \bar{2} & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (10)$$

На основе: $\begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ определить оси 6_{4D} и $\bar{6}_{4D}$:

$$6_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & \bar{1} & \bar{2} & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{1} & \bar{3} & \bar{2} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & \bar{2} & \bar{1} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & 4 & \bar{2} & \bar{3} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\bar{6}_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{3} & 1 & 2 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & 1 & \bar{3} & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{4} & \bar{2} & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{4} & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Точечная группа кубической решетки (23) в представлении групп подстановок имеет вид:

$$\begin{matrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&1&2\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&3&1\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{3}&\bar{1}&2\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}&3&\bar{1}\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{3}&1&\bar{2}\\1&2&3\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}2&\bar{3}&\bar{1}\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&\bar{1}&\bar{2}\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{2}&\bar{3}&1\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\bar{2}&\bar{3}\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}&2&\bar{3}\\1&2&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\bar{1}&\bar{2}&3\\1&2&3\end{pmatrix}\end{matrix}. \quad (13)$$

В 3D-пространстве решетка может иметь только одну ось 6. Две оси 6_{3D} существовать не могут. Рассмотрим ось 6, совпадающую с осью z_{3D} и y_{3D}. Для удобства расчета рассмотрим матрицы-генераторы групп этих поворотов в кристаллографической системе координат: $3_z \times 3_y \Rightarrow \begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\1&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}\times\begin{vmatrix}0&0&\bar{1}\\0&1&0\\1&0&1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0&\bar{1}&0\\0&1&\bar{1}\\1&0&1\end{vmatrix} = m^1$. Предположим, что m^1 – матрица-генератор точечной группы 6х6. Тогда $\begin{vmatrix}0&\bar{1}&1\\1&1&0\\0&1&0\end{vmatrix}^{(2)}\begin{vmatrix}1&\bar{1}&1\\1&1&0\\0&0&1\end{vmatrix}^{(3)}\begin{vmatrix}1&\bar{1}&0\\1&0&\bar{1}\\0&\bar{1}&0\end{vmatrix}^{(4)}\begin{vmatrix}1&0&1\\0&\bar{1}&0\\0&1&0\end{vmatrix}^{(5)}\begin{vmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&\bar{1}&0\end{vmatrix}^{(6)}$ ... Расчет до значений n матрицы m^n показал, что на основе «матрицы-генератора» m^1 группа не формируется.

Таблица 2. **– Пример взаимодействия поворотов вокруг 6_{4D}, построенных на осях 3_{3D}**

	$5\begin{pmatrix}2&3&1&\bar{4}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$6\begin{pmatrix}\bar{4}&1&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$7\begin{pmatrix}4&\bar{2}&1&3\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$8\begin{pmatrix}\bar{1}&\bar{4}&2&\bar{3}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$
$1\begin{pmatrix}2&3&1&\bar{4}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&1&2&4\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&\bar{3}&\bar{4}&2\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}&1&4&\bar{3}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{4}&2&\bar{1}&3\\1&2&3&4\end{pmatrix}$
$2\begin{pmatrix}\bar{4}&1&\bar{3}&\bar{2}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{4}&2&\bar{1}&\bar{3}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2&\bar{4}&3&\bar{1}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{3}&4&\bar{1}&2\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&\bar{1}&\bar{2}&4\\1&2&3&4\end{pmatrix}$
$3\begin{pmatrix}4&\bar{2}&1&3\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{4}&\bar{3}&2&1\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}&1&\bar{4}&\bar{3}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}3&2&4&1\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{3}&4&\bar{1}&2\\1&2&3&4\end{pmatrix}$
$4\begin{pmatrix}\bar{1}&\bar{4}&2&\bar{3}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{2}&4&3&1\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}4&\bar{3}&\bar{2}&\bar{1}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\bar{4}&\bar{3}&\bar{2}&\bar{1}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&3&\bar{4}&\bar{2}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$

Каждая ось 3_{3D} позволяет сформировать 4 оси 6_{4D}. Таким образом, в 4D-пространстве имеется 16 групп 6-го порядка, которые и отождествляются с группами 6_{4D}. Матрица Кэли будет содержать 147 456 элементов. Методом случайной выборки взяты по одной матрице из четырех групп 6_{4D}, построенных на основе различных 3_{3D}.

Операции точечной симметрии, как и в 3D-пространстве, делятся на две группы. Собственные движения – операции симметрии 1-го рода, если матрица-генератор в группе подстановок является нечетной. Четность определяется числом перестановок элементов матрицы группы подстановок до единичной матрицы и к этому числу добавляется число элементов «минус». Пример, когда матрица описывает собственное движение: $\begin{pmatrix}\bar{4}&1&3&\bar{2}\\1&2&3&4\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}1&3&2&\bar{4}\\1&2&3&4\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}1&2&3&\bar{4}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$. Пример матрицы в 4$D$-пространстве, описывающей несобственное движение, так как 1 включает 0 перестановок и 4 «минуса»: $\begin{pmatrix}\bar{1}&\bar{2}&\bar{3}&\bar{4}\\1&2&3&4\end{pmatrix}$. Аналогом собственного вращения вокруг оси 4 в 4D-пространстве будет поворот, описываемый матрицей с четным числом перестановок и с нечетным числом знаков «минус»: $\begin{pmatrix} 2 & \bar{1} & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 & 1 & \bar{3} & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$. Так как $\bar{1}_{4D} \Rightarrow \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{2} & \bar{3} & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$ – собственное движение, то наряду с матрицами указанного типа появятся матрицы с тремя знаками «минус», то есть с нечетным числом минусов в верхней строке матрицы. В $4D$-решетке имеется 16 осей 4_{4D}. Каждая из групп 4_{4D} включает три неединичные матрицы. Если на повороты вокруг осей 3_{4D} действуют операции только подгруппы групп 6_{4D}, то общее число матриц для осей 6_{4D} и 4_{4D} с учетом матриц $\pm\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$ равно 130. Так как в группе $4D$-кубической решетки собственные и несобственные движения описываются одинаковым числом матриц, то можно считать, что число матриц для осей 6_{4D} и 4_{4D} – 621 матрица. Если генератор группы 4_{4D} умножить на $\bar{1}_{4D}$, то будут созданы матрицы-генераторы групп 3_{4D}, которые являются подгруппами групп 6_{4D} с элементами $\frac{\bar{n}}{n}$ в матрицах подстановок. Операции симметрии 2-го рода в представлении групп подстановок описываются матрицами-генераторами с элементами $\frac{n}{n}$ и парами $\frac{n}{m}, \frac{m}{n}$. Например, $\begin{pmatrix} \bar{3} & 2 & 1 & \bar{4} \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}$.

$\frac{n}{m}, \frac{m}{n}$ должны иметь одинаковый знак («минус» или «плюс»). Матрица с четной суммой перестановок или с четным числом «минусов» соответствует операциям $3D$-m, с нечетной суммой $3D$-2. Таким образом, точечные группы кристаллических решеток всех сингоний являются подгруппами голоэдрической группы $4D$-кубической решетки.

Заключение. Точечная симметрия гексагональной плотнейшей упаковки в матричном представлении в декартовой системе в качестве элементов матриц имеет значения $\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{\sqrt{3}}{2}$. В матрицах групп точечной симметрии в кристаллографическом базисе элементами матриц являются 0 и ± 1, но $|1|$ может встречаться в отдельной строке или в отдельном столбце два раза. У всех решеток других сингоний элементами матриц являются $0, \pm 1$ независимо от базиса. Эти решетки – $3D$, $4D$ можно описать точечными симметриями в представлении групп подстановок. Показано, что это представление можно использовать для описания точечных симметрий в пространствах любых размерностей. В работе анализируется симметрия $4МК$ ($4D$-гиперкуба). Рассмотрены матрицы-генераторы точечных групп $4МК$ в представлении групп подстановок. Порядок голоэдрии $4МК$ равен 384. Для описания всей группы требуется достаточно объемное исследование, поэтому исследовался только вопрос: является ли группа точечной симметрии подгруппой группы $4D$-гиперкуба. Установлено, что $4МК$ в качестве подгрупп включает все элементы симметрии $3D$-решетки $6, \bar{6}, 4, \bar{4}, 3, \bar{3}, 2, m, \bar{1}$. Приведены примеры «произведений» 6_{4D} осей, приводящие к возникновению осей с порядками $n \le 4$. Рассмотрены переходы от $4D$-матриц подстановок к $3D$-матрицам *ГПУ* на основе $4D$-гиперкуба.

Литература

1. *Вайнштейн, В. Б.* Современная кристаллография / В. Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979. – Т. 1. – 384 с.
2. *Поклонский, Н. А.* Точечные группы симметрии: учеб. пособие / Н. А. Поклонский // Минск : БГУ, 2003. – 222 с.
3. *Лиопо, В. А.* Гексагональная решетка в четырехмерном пространстве / В. А. Лиопо // Весці Нацыянальнай Акадэміі навук Беларусі. Сер. фізіка-матэматычных навук. – 1999. – № 1. – С. 103–106.
4. *Любарский, Г. Я.* Теория групп и физика / Г. Я. Любарский. – М. : Наука, 1986. – 225 с.
5. *Киреев, П. С.* Введение в теорию групп и ее применение в физике твердого тела / П. С. Киреев. – М. : Высш. школа, 1979. – 207 с.
6. *Mitin, V. V.* Quantum Mechanics for Nanostructures / V. V. Mitin, D. I. Sementsov, N. Z. Vagidov. – Cambridge : Cambridge university press, 2010. – 488 p.

References

1. *Vajnshtejn, V. B.* Sovremennaya kristallografiya / V. B. Vajnshtejn. – M. : Nauka, 1979. – T. 1. – 384 s.
2. *Poklonskij, N. A.* Tochechnye gruppy simmetrii: ucheb. posobie / N. A. Poklonskij // Minsk : BGU, 2003. – 222 s.
3. *Liopo, V. A.* Geksagonal'naya reshetka v chetyrekhmernom prostranstve / V. A. Liopo // Vesci Nacyyanal'naj Akademii navuk Belarusi. Ser. fizika-matematychnyh navuk. – 1999. – № 1. – S. 103–106.
4. *Lyubarskij, G. Ya.* Teoriya grupp i fizika / G. Ya. Lyubarskij. – M. : Nauka, 1986. – 225 s.
5. *Kireev, P. S.* Vvedenie v teoriyu grupp i ee primenenie v fizike tverdogo tela / P.S. Kireev. – M. : Vyssh. shkola, 1979. – 207 s.
6. *Mitin, V. V.* Quantum Mechanics for Nanostructures / V. V. Mitin, D. I. Sementsov, N. Z. Vagidov. – Cambridge : Cambridge university press, 2010. – 488 p.