

СПЕЦІАЛЬНІ ЕКСПОНЕНЦІЙНІ ФУНКЦІЇ НА ГРАТКАХ ПРОСТИХ АЛГЕБР ЛІ ТА АЛОТРОПНІ МОДИФІКАЦІЇ КАРБОНУ

Modern definitions and properties of special orbits-functions of simple Lie algebras are systematized. Models of carbon modifications related to simple Lie algebras and Coxeter groups are proposed.

Систематизовано означення та властивості спеціальних орбіт-функцій простих алгебр Лі. Запропоновано моделі модифікацій карбону, що пов'язані з простими алгебрами Лі та групами Коксетера.

1. Вступ. Вже тривалий час спостерігається інтенсивне зростання кількості багатовимірних даних та необхідність їх обробки і аналізу. Крім цього, у задачах сучасної математики та фізики все частіше виникає потреба використовувати неортогональні системи координат, ґратки та сітки (наприклад, ґратки зі стільниковими плитками у алотропних модифікаціях карбону). Іншим важливим прикладом є задача дискретизації комплексного аналізу і факторизація умов Коші – Рімана, яка була успішно розв'язана на ґратці утвореній правильними трикутниками у роботах Диннікова та Новікова (див. [1] та інші роботи авторів).

Ефективним інструментом для досліджень пов'язаних з такими ґратками є кореневі та вагові системи простих груп Лі та спеціальні експоненційні функції (*орбіт-функції*) симетричні відносно дії відповідної афінної групи Вейля. Такі функції можна використовувати для перетворень аналогічних перетворенню Фур'є, вони пов'язані з важливими класами ортогональних поліномів, є розв'язками певних крайових задач Неймана та Діріхле та добре дискретизуються на сітках узгоджених з фундаментальними областями простих груп Лі [8, 10, 11].

Для визначення орбіт-функцій стисло наведемо необхідні поняття та факти про кореневі системи та групи Вейля алгебр Лі [2, 3].

Кожна з простих алгебр Лі A_n ($n \geq 1$), B_n ($n \geq 3$), C_n ($n \geq 2$), D_n ($n \geq 4$), E_6 , E_7 , E_8 , F_4 та G_2 визначається матрицею Картана, діаграмою Динкіна або системою простих коренів $\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$, яка є базисом дійсного евклідового простору \mathbb{R}^n зі стандартним скалярним добутком $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Такий α -базис неортогональний та містить прості корені однієї довжини (для алгебр A_n , D_n , E_6 , E_7 , E_8) або двох різних довжин: короткі (s) та довгі (l) (у випадку алгебр B_n , C_n , F_4 , G_2). Не обмежуючи загальності, можна вважати, що квадрати довжин довгих коренів рівні 2, а коротких – 1. Для узагальнення наведених нижче означень і властивостей на випадок напівпростих алгебр Лі досить взяти до уваги, що α -базиси їх простих компонент взаємно ортогональні.

З кожною простою алгеброю Лі асоційовано скінченну групу W дзеркальних відображень (групу Вейля), яка породжує кореневу систему алгебри Δ з її простих коренів. Дзеркальні відображення r_{α_i} відносно $(n-1)$ -вимірних гіперплощин, що ортогональні до простих коренів α_i , $i = 1, \dots, n$ та проходять через початок координат, задаються співвідношенням

$$r_i x = r_{\alpha_i} x = x - \frac{2\langle x, \alpha_i \rangle}{\langle \alpha_i, \alpha_i \rangle} \alpha_i, \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (1)$$

У випадку двох довжин коренів має місце неперетинний розклад кореневої системи на множини коротких та довгих коренів $\Delta = \Delta_s \cup \Delta_l$. Відображення відносно коренів з множин Δ_s та Δ_l породжують відповідно групи Вейля W_s та W_l , які є нормальними підгрупами у W , але мають нетривіальний перетин, оскільки довгі та короткі корені не взаємно ортогональні. Насправді важливим фактом є те, що у групах W_s і W_l існують такі підгрупи \tilde{W}_s і \tilde{W}_l такі, що $W \simeq \tilde{W}_s \times W_l$ і $W \simeq W_s \times \tilde{W}_l$.

Нехай ω -базис — базис фундаментальних ваг, який є \mathbb{Z} -дуальним до базису простих коренів. Для груп Лі з коренями різних довжин зручно додатково ввести двоїсті базиси до α - та ω -базисів, а саме $\check{\omega}$ -коваговий базис та $\check{\alpha}$ -кокореневий базис відповідно. У евклідовому просторі \mathbb{R}^n розглянемо дві пари ґраток: кореневу ґратку Q , вагову P та дуальні до них:

$$Q = \mathbb{Z}\alpha_1 + \mathbb{Z}\alpha_2 + \dots + \mathbb{Z}\alpha_n, \quad P = \mathbb{Z}\omega_1 + \mathbb{Z}\omega_2 + \dots + \mathbb{Z}\omega_n.$$

У загальному випадку $Q \subseteq P$, але для алгебр Лі рангу 3 рівність не має місця. Аналогічно визначаються дуальні ґратки

$$\check{Q} = \mathbb{Z}\check{\alpha}_1 + \mathbb{Z}\check{\alpha}_2 + \dots + \mathbb{Z}\check{\alpha}_n, \quad \check{P} = \mathbb{Z}\check{\omega}_1 + \mathbb{Z}\check{\omega}_2 + \dots + \mathbb{Z}\check{\omega}_n.$$

У ваговій ґратці P означимо конуси домінантних ваг P^+ та строго домінантних ваг P^{++} :

$$P \supset P^+ = \mathbb{Z}^{\geq 0}\omega_1 + \dots + \mathbb{Z}^{\geq 0}\omega_n \supset P^{++} = \mathbb{Z}^{> 0}\omega_1 + \dots + \mathbb{Z}^{> 0}\omega_n.$$

Прості корені $\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ індукують відношення часткового порядку \leq на \mathbb{R}^n , а саме: для $x, y \in \mathbb{R}^n$ має місце нерівність $x \leq y$ тоді і лише тоді, коли $y - x = c_1\alpha_1 + \dots + c_n\alpha_n$ і $c_i \in \mathbb{Z}^{\geq 0}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Для кожної простої алгебри Лі у кореневій системі Δ існує єдиний старший корінь ξ (найбільший відносно заданого порядку)

$$\xi = m_1\alpha_1 + m_2\alpha_2 + \dots + m_n\alpha_n.$$

Афінною групою Вейля $W^{\text{aff}} = \check{Q} \rtimes W$ є прямий добуток групи зсувів та групи Вейля, вона породжується дзеркальними відображеннями r_{α_i} та додатковим відображенням r_0 :

$$r_0x = r_\xi x + \frac{2\xi}{\langle \xi, \xi \rangle}, \quad \text{де} \quad r_\xi x = x - \frac{2\langle x, \xi \rangle}{\langle \xi, \xi \rangle} \xi, \quad x \in \mathbb{R}^n. \quad (2)$$

Стандартний симплекс $F = \{x \mid \langle \alpha_i, x \rangle \geq 0, i = 1, 2, \dots, n, \langle \xi, x \rangle \leq 1\}$ у \mathbb{R}^n є фундаментальною областю афінної групи Вейля W^{aff} , вершини цієї фундаментальної області наступні: $\left\{0, \frac{\check{\omega}_1}{m_1}, \frac{\check{\omega}_2}{m_2}, \dots, \frac{\check{\omega}_n}{m_n}\right\}$.

Останньою компонентою, необхідною для означення орбіт-функцій, є гомоморфізми знаків групи Вейля $\sigma : W \rightarrow \{\pm 1\}$. Аналізуючи діаграми Динкіна та накладаючи умови гомоморфізму, можна отримати лише чотири різні типи гомоморфізмів σ :

1. $\sigma^+ : \sigma^+(r_i) = 1, i = 1, 2, \dots, n$, — знаки не змінюються, тотожне перетворення;
2. $\sigma^- : \sigma^-(r_i) = -1, i = 1, 2, \dots, n$, — стандартна функція sign , знак залежить від парності необхідної кількості віддзеркалень;
3. $\sigma^l : \sigma^l(r_i) = -1$, якщо α_i довгий корінь, та $\sigma^l(r_j) = 1$, якщо α_j короткий корінь;
4. $\sigma^s : \sigma^s(r_i) = -1$, якщо α_i короткий корінь, та $\sigma^s(r_j) = 1$, якщо α_j довгий корінь.

Чотири основні класи *орбіт-функцій* $f_\lambda^\sigma : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ параметризованих точками $\lambda \in \mathbb{R}^n$ визначаються для змінної $x \in \mathbb{R}^n$ відповідно до різних гомоморфізмів знаків групи Вейля

$$f_\lambda^\sigma(x) := \sum_{w \in W} \sigma(w) e^{2\pi i \langle w\lambda, x \rangle}. \quad (3)$$

Симетричні та антисиметричні суми експонент орбіти групи Вейля зустрічаються у стандартній теорії зображень алгебр Лі (наприклад, як характеристики зображень), проте систематичне вивчення та застосування таких сум як окремих спеціальних функцій ініційоване у роботах Клімика та Патери [4, 5] та інтенсивно розвивається у десятках подальших наукових публікацій.

Розглянемо основні типи орбіт-функцій для кожного з гомоморфізмів знаку [4–6]:

1. $\sigma = \sigma^+ : f_\lambda^{\sigma^+}(x) = C_\lambda(x) = \sum_{w \in W} e^{2\pi i \langle w\lambda, x \rangle}$ — випадок симетричної *C-функції*, яка для алгебри A_1 співпадає з тригонометричною функцією косинус, що і обумовило назву.

2. $\sigma = \sigma^- : f_\lambda^{\sigma^-}(x) = S_\lambda(x) = \sum_{w \in W} (-1)^{p(w)} e^{2\pi i \langle w\lambda, x \rangle}$, де $p(w)$ — кількість елементарних дзеркальних відображень r_i , які необхідні для отримання точки $w\lambda$ з точки λ . Це випадок антисиметричної *S-функції*, яка для алгебри A_1 співпадає з тригонометричною функцією синус.

3. $\sigma = \sigma^l : f_\lambda^{\sigma^l}(x) = S_\lambda^l(x) = \sum_{w \in W} \sigma^l(w) e^{2\pi i \langle w(\lambda + \varrho_l), x \rangle}$, де ϱ_l — півсума додатних коренів з Δ_l , це випадок *S^l-функції*, у якій знаки доданків змінюються лише для віддзеркалень відносно довгих коренів [6].

4. $\sigma = \sigma^s : \sum f_\lambda^{\sigma^s}(x) = S_\lambda^s(x) = \sum_{w \in W} \sigma^s(w) e^{2\pi i \langle w(\lambda + \varrho_s), x \rangle}$, де ϱ_s — півсума додатних коренів з Δ_s , це випадок *S^s-функції*, у якій знаки доданків змінюються лише для віддзеркалень відносно коротких коренів.

Якщо у означенні *C-функції* замінити орбіту групи Вейля W_λ на орбіту її парної підгрупи $W_{e,\lambda}$, то ми отримаємо ще один клас орбіт-функцій, а саме *E-функції*, які у випадку алгебри A_1 співпадають з експонентою $E_\lambda(x) := \sum_{w \in W_e} e^{2\pi i \langle w\lambda, x \rangle}$. *E-функції* також можна отримати як лінійну комбінацію *C-* та *S-функцій* $E_\lambda(x) = \frac{1}{2}(C_\lambda(x) + S_\lambda(x))$. Можна побудувати шість різних типів *E-функцій* для алгебр Лі з коренями різної довжини, узагальнивши такі лінійні комбінації на випадок напівсум чи напіврізниць усіх можливих пар основних орбіт-функцій.

Загалом орбіт-функції є скінченними сумами експонент, тому вони є неперервними та мають неперервні похідні всіх порядків.

Використовуючи тотожність $\langle \lambda, r_i x \rangle = \langle r_i \lambda, x \rangle$ для відображень з афінної групи Вейля та гомоморфізми знаків, ми отримуємо наступні властивості симетрії орбіт-функцій:

$$C_\lambda(r_i x) = C_{r_i \lambda}(x) = C_\lambda(x), \quad i = 0, \dots, n,$$

$$S_{r_i \lambda}(x) = S_\lambda(r_i x) = -S_\lambda(x), \quad i = 0, \dots, n,$$

$$S_\lambda^l(r_i x) = -S_\lambda^l(x), \quad i = 0, \dots, n \quad \text{якщо } r_i \text{ відповідає довгому кореню,}$$

$$S_\lambda^l(r_i x) = S_\lambda^l(x), \quad i = 1, \dots, n \quad \text{якщо } r_i \text{ відповідає короткому кореню,}$$

$$S_\lambda^s(r_i x) = S_\lambda^s(x), \quad i = 0, \dots, n \quad \text{якщо } r_i \text{ відповідає довгому кореню,}$$

$$S_{\lambda}^s(r_i x) = -S_{\lambda}^s(x), \quad i = 1, \dots, n \quad \text{якщо } r_i \text{ відповідає короткому кореню.}$$

S -функції антисиметричні відносно $(n-1)$ -вимірних граней фундаментальної області F , тому вони є нульовими на межі F . C -функції симетричні відносно $(n-1)$ -вимірних граней фундаментальної області F , їх нормальні похідні є S -функціями і тому нульові на межі F . S^s -функції та S^l -функції антисиметричні відносно певних граней фундаментальної області F , тому вони є нульовими на частині межі F .

Нехай скалярний добуток орбіт-функцій на фундаментальній області F визначається формулою:

$$\langle f_{\lambda}^{\sigma}(x), f_{\lambda'}^{\sigma}(x) \rangle := \int_F f_{\lambda}^{\sigma}(x) \overline{f_{\lambda'}^{\sigma}(x)} dx, \quad (4)$$

де $\overline{f_{\lambda'}^{\sigma}(x)}$ позначає комплексне спряження, а інтегрування відбувається відносно евклідової міри.

Нехай $\lambda, \lambda' \in P^+$, тоді будь-яка пара орбіт-функцій з того самого класу є ортогональною на відповідній фундаментальній області відносно скалярного добутку (4):

$$\begin{aligned} \langle C_{\lambda}(x), C_{\lambda'}(x) \rangle &= |\text{Stab}(\lambda)| \cdot |W| \cdot |F| \cdot \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \langle S_{\lambda}(x), S_{\lambda'}(x) \rangle &= |W| \cdot |F| \cdot \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \langle S_{\lambda}^l(x), S_{\lambda'}^l(x) \rangle &= \frac{|W|^2 \cdot |F|}{|W_{\lambda+\varrho_l}|} \cdot \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \langle S_{\lambda}^s(x), S_{\lambda'}^s(x) \rangle &= \frac{|W|^2 \cdot |F|}{|W_{\lambda+\varrho_s}|} \cdot \delta_{\lambda\lambda'}. \end{aligned}$$

Тут $\delta_{\lambda\lambda'}$ — дельта-символ Кронекера, $|W|$ — порядок групи Вейля, $|W_{\lambda+\varrho_l}|$ — розмірність орбіти точки $\lambda + \varrho_l$ під дією групи Вейля, $|\text{Stab}(\lambda)|$ — порядок стабілізатора точки λ , а $|F|$ — об'єм фундаментальної області. Ортогональність орбіт-функцій впливає з ортогональності експонент та того факту, що задана вага $\lambda \in P$ завжди належить рівно одній орбіті.

Таким чином, кожен з класів орбіт-функцій утворює ортогональний базис у гільбертовому просторі квадратично інтегрованих функцій $\mathcal{L}^2(F)$, тому такі функції можуть бути розкладені в ряд за орбіт-функціями.

Нехай неперервну змінну x задано в ортонормованому базисі з координатами x_1, x_2, \dots, x_n . Припустимо, що точку λ , яка нумерує та визначає орбіт-функцію, також задано у ортонормованому e -базисі, тоді скалярні добутки у експоненційних компонентах орбіт-функцій перетворюються на суми попарних добутків координат. Оператор Лапласа у ортогональних координатах має вигляд $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_k^2}$, де $k = n$ або $k = n + 1$ для A_n .

Оскільки оператор Лапласа має те саме власне значення для кожної з експонент (які є доданками орбіт-функцій), а саме число $-4\pi^2 \langle \lambda, \lambda \rangle$, то орбіт-функції $C_{\lambda}(x)$, $E_{\lambda}(x)$ та $S_{\lambda}(x)$, задані у ортонормованому базисі, є власними функціями оператора Лапласа:

$$\nabla^2 C_{\lambda}(x) = -4\pi^2 \langle \lambda, \lambda \rangle C_{\lambda}(x), \quad \nabla^2 E_{\lambda}(x) = -4\pi^2 \langle \lambda, \lambda \rangle E_{\lambda}(x), \quad \nabla^2 S_{\lambda}(x) = -4\pi^2 \langle \lambda, \lambda \rangle S_{\lambda}(x).$$

На границі ∂F фундаментальної області C -функції мають нульову нормальну похідну (оскільки вона співпадає з S -функцією, яка є антисиметричною), а S — є нульовими на границі фундаментальної області F для усіх простих груп Лі, тому C_λ -функції є власними функціями оператора Лапласа на n -вимірному симплексі F , що задовольняють крайову умову Неймана

$$\left. \frac{\partial f(x)}{\partial \nu} \right|_{\partial F} = 0, \quad \text{де } \nu \text{ — нормаль до } \partial F.$$

S_λ -функції є власними функціями оператора Лапласа на n -вимірному симплексі F , що задовольняють крайову умову Діріхле

$$f(x)|_{\partial F} = 0.$$

Такі властивості орбіт-функцій успішно застосовуються і до розв'язання мішаних крайових задач [7]. Наприклад, крайові задачі з умовами типу Діріхле, Неймана або мішаними крайовими умовами для однорідного рівняння Гельмгольца $\nabla^2 \varphi(x) = -v^2 \varphi(x)$, де $v \in \mathbb{R}^+$, $x \in \mathbb{R}^n$ розв'язуються за допомогою різних орбіт функцій на фундаментальних областях напівпростих алгебр Лі обраних відповідно до кількості змінних рівняння, форми потрібної області та поведінки розв'язку на межі області. При потребі, будь-яку просту алгебру можна редукувати до випадку $A_1 \times \dots \times A_n$, що додатково дозволяє розділити змінні у орбіт-функціях та рівнянні.

Ще однією важливою властивістю орбіт-функцій є їх зв'язок з ортогональними поліномами, такими як поліноми Чебишева, Якобі та Макдональда. Такі поліноми будуються з орбіт-функцій алгебраїчними методами: заміною експонент, тригонометричних функцій чи за допомогою рекурсії виходячи з орбіт-функцій фундаментальних ваг [10, 11] та зберігають всі властивості, включаючи дискретизацію.

Розглянуті орбіт-функції є комплекснозначними функціями, проте, для деяких простих алгебр Лі, орбіти групи Вейля складаються з пар, які породжують у орбіт-функціях комплексно спряжені доданки. Такими алгебрами є: A_1 , G_2 , E_7 , E_8 , B_n , C_n , D_{2n} , отже, їх C -функції завжди дійснозначні. Для алгебр $A_{n \geq 2}$, E_6 та D_{2n-1} дійсні функції можна побудувати симетризавши спеціальним чином координати λ .

В загальному випадку для роботи з дійснозначними функціями $\forall a \in \mathbb{R}$ замість експоненти використовуються функції ядра Хартлі

$$\text{cas}(a) = \sin(a) + \cos(a) = \sqrt{2} \sin\left(x + \frac{\pi}{4}\right) = \sqrt{2} \cos\left(x - \frac{\pi}{4}\right).$$

Аналогічно до комплекснозначних визначаються дійснозначні орбіт-функції $h_\lambda^\sigma: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ параметризовані точками $\lambda \in \mathbb{R}^n$

$$h_\lambda^\sigma(x) := \sum_{w \in W} \sigma(w) \text{cas}(2\pi \langle w\lambda, x \rangle). \quad (5)$$

При цьому $h_\lambda^\sigma(x) = \text{Re}(f_\lambda^\sigma(x)) + \text{Im}(f_\lambda^\sigma(x))$.

Дискретні методи для дійснозначних та комплекснозначних орбіт-функцій будуються одно-типно для різних простих алгебр Лі виходячи з подрібнення фундаментальної області, дуальних афінних груп Вейля, решіток дуальних до кореневих та максимальних торів простих груп Лі.

Для багатьох випадків у явному вигляді отримано формули об'ємів фундаментальних областей, кількості точок сітки, розмірності стабілізаторів та ряд інших необхідних компонент для дискретного аналізу, що базується на орбіт-функціях, див. [8, 9] та посилання у цих роботах.

Орбіт-функції знайшли широкий спектр застосувань у задачах з обробки зображень, наближень та інтерполяції багатовимірних функцій, проте особливо важливим є застосування орбіт-функцій до математичних моделей структур та явищ, які конструктивно пов'язані з кореневими або ваговими ґратками груп Коксетера. Прикладами таких структур є відкриті протягом останніх двох десятиліть нові алотропні модифікації карбону, а саме: графен, фулерени, нанотрубки та нанокільця. Дослідники у галузях хімії, фізики та біології відкривають все нові й нові властивості цих речовин, тому вивчення математичних властивостей відповідних многогранників і мозаїк, а також спеціальних функцій узгоджених з ними, видається надзвичайно важливою задачею.

Графен — майже прозорий матеріал, який є першим двовимірним матеріалом товщиною всього в один атом. З точки зору математики графен є замощенням двовимірної площини правильними шестикутниками, тобто плоскою періодичною мозаїкою з однією базовою плиткою у формі шестикутника. Усі вершини мозаїки мають степінь три, тобто з кожної вершини виходить по 3 ребра, які розташовані у одній площині з кутом $\frac{2\pi}{3}$ між сусідніми ребрами. Отже, розглянута модель задовольняє ознакам sp^2 -гібридизації і має поворотну симетрію на кут $\frac{2\pi}{3}$, яка задовольняє класичній кристалографії. Виходячи з поворотної симетрії робимо висновок, що для побудови графену можуть бути використані кореневі ґратки простих алгебр A_2 і G_2 рангу два або проєкції на двовимірну площину корневих ґраток простих алгебр A_3 і B_3 рангу три (проєкція на підалгебру ізоморфну A_2).

В усіх цих випадках отримана базова плитка (шестикутник) розмножується на всю площину дією відповідної афінної групи Вейля, породженої віддзеркаленнями заданими формулами (1) і (2). Для виконання усіх необхідних побудов (див. рис. 1 та 2) наведемо для кожної з алгебр її діаграму Динкіна (зафарбовані вершини кодують короткий корінь, між простими коренями з'єднаними одним ребром кут $\frac{2\pi}{3}$, двома ребрами — $\frac{3\pi}{4}$, трьома ребрами — $\frac{5\pi}{6}$) та матрицю Картана \mathfrak{C} , що задає скалярні добутки фундаментальних ваг та простих коренів:

$$A_2: \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ \circ \text{---} \circ \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \end{array} \quad \mathfrak{C} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}; \quad G_2: \begin{array}{c} 2 \quad 3 \\ \circ \text{---} \bullet \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \end{array} \quad \mathfrak{C} = \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ -1 & 2 \end{pmatrix};$$

$$A_3: \begin{array}{c} 1 \quad 1 \quad 1 \\ \circ \text{---} \circ \text{---} \circ \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \alpha_3 \end{array} \quad \mathfrak{C} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}; \quad B_3: \begin{array}{c} 1 \quad 2 \quad 2 \\ \circ \text{---} \circ \text{---} \bullet \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \alpha_3 \end{array} \quad \mathfrak{C} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Площина покрита мозаїкою з правильних шестикутників (див. рис. 3) може бути розбита на нескінченні паски (див. рис. 4) складені з шестикутників, де два сусідні шестикутники мають спільний відрізок (2 вершини та ребро, що їх сполучає). Такі паски є основними елементами для побудови нанотрубок. Вуглецеві *нанотрубки* — алотропна модифікація карбону, вони мають форму тонких порожніх циліндрів. Нанотрубки будуються з скінченної парної кількості

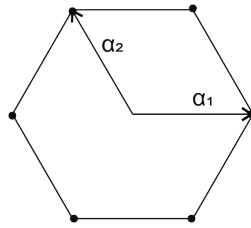


Рис. 1. Базова шестикутна плитка мозаїки побудована з простих коренів алгебри A_2 , вершини повністю співпадають з кореневою системою.

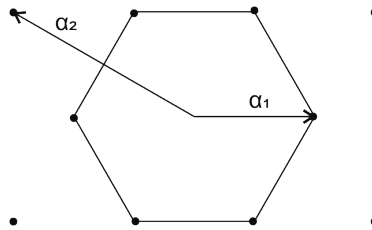


Рис. 2. Точки кореневої системи алгебри G_2 та базова шестикутна плитка мозаїки побудована лише з коротких коренів. Частина кореневої системи, що відповідає нормальній підгрупі W_l є зайвою і опускається.

пасків розташованих зі зсувом на половину базової плитки і з'єднаних між собою без утворення додаткових плиток мозаїки, при цьому вільні ребра крайніх пасків ототожнюються (математична 'склейка'). Парність набору пасків є суттєвою, оскільки склейка непарної кількості пасків призводить до появи нових не шестикутних (ромбовидних) плиток. Мінімальна (найтонша) нанотрубка утворюється двома нескінченими пасками.

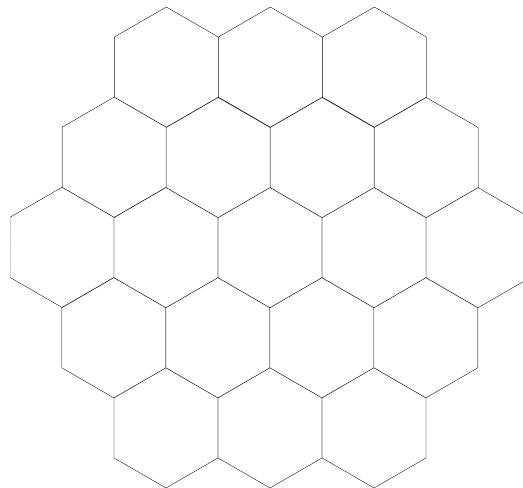


Рис. 3. Фрагмент графену побудованого відображеннями r_0, \dots, r_n фундаментальної шестикутної плитки відносно її ребер.

Замикання обмеженого циліндру нанотрубки у тор (ототожнення ребер шестикутників розташованих на кінцях) дозволяє побудувати модель *нанокільця*, при цьому важливим є вибір обмеженої частини нанотрубки так, щоб на краях були розташовані замкнені паски зі зсувом на половину плитки.

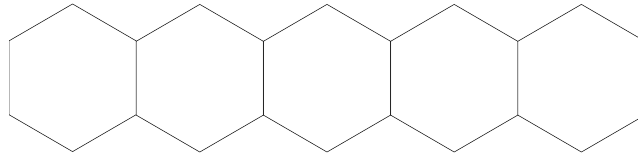
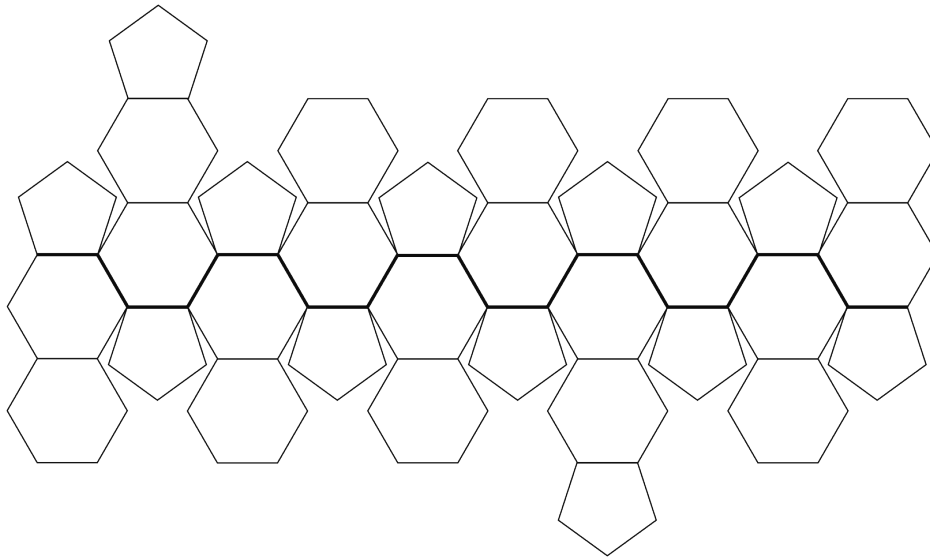


Рис. 4. Базовий пасок з шестикутників для побудови нанотрубок.

Суттєво тривимірною алотропною модифікацією карбону, яка не може бути отримана з двовимірної шестикутної мозаїки, є фулерени — речовини, що складаються тільки з карбонових елементів і мають сферичну, еліптичну або трубчасту структуру. Структура фулерена подібна до графіту, відмінність полягає в тому, що в фулерені зустрічаються п'ятичленні кільця (грані у формі правильного п'ятикутника), а найвідомішим та найбільш дослідженим з яких є фулерен C_{60} , див. рис. 5.

Рис. 5. Розріз фулерена C_{60} . Для побудови нанотрубок відбувається вклейка зигзагів з шестикутників у розріз позначений жирною суцільною лінією.

Наявність правильних п'ятикутних граней свідчить про поворотну симетрію на кут $\frac{3\pi}{5}$, який заборонений класичною кристалографією та не зустрічається серед ґраток простих груп Лі, проте зустрічається у ґратках груп Коксетера. Зокрема фулерен C_{60} можна побудувати проєкцією кореневої ґратки групи Коксетера H_3 , при умові збереження симетрії групи Лі A_2 [12].

Наведена модель дозволяє будувати обмежені нанотрубки C_{60+10k} , $k = 1, 2, \dots$ вклейкою довільної кількості зигзагів з 10 шестикутників у модель фулерена на місці позначеному жирною лінією на рис. 5.

Зауважимо, що в усіх моделях (окрім графену!) порушується властивість sp^2 -гібридизації, оскільки утворюються три гібридні орбіталі з осями, які не розташовані в одній площині і плоскі кути не дорівнюють $\frac{2\pi}{3}$.

Для обчислень та побудови фулерена за допомогою проєкцій наведемо діаграму Коксетера та матрицю Картана \mathfrak{C} некристалографічної групи

$$H_3 : \begin{array}{c} \circ \text{---} \circ \text{---} \bullet \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \alpha_3 \end{array} \quad \mathfrak{g} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 \cos \frac{\pi}{5} \\ 0 & -2 \cos \frac{\pi}{5} & 2 \end{pmatrix}.$$

Всі вищенаведені моделі, що побудовані за допомогою простих груп Лі, дозволяють аналіз із застосуванням неперервних та дискретних орбіт-функцій, теорію яких викладено на початку статті. Що ж стосується некрystalографічних груп Коксетера, то властивості аналогічних спеціальних функцій вимагають додаткового вивчення та доведення і вони є об'єктом наших подальших досліджень.

Авторка вдячна Їржі Патері за постановку ряду задач, пов'язаних з орбіт-функціями та плідні наукові дискусії про теорію та властивості простих алгебр Лі та їх кореневих систем. Також авторка висловлює вдячність за фінансову підтримку в рамках програми підтримки пріоритетних для держави наукових досліджень і науково-технічних (експериментальних) розробок Відділення математики НАН України на 2022–2023 рр. (Проект “Інноваційні методи у теорії диференціальних рівнянь, обчислювальній математиці та математичному моделюванні”, № 7/1/241).

Література

1. I. A. Dynnikov, S. P. Novikov, *Geometry of the triangle equation on two-manifolds*, Mosc. Math. J., **3**, 419–438 (2003); DOI: 10.17323/1609-4514-2003-3-2-419-438.
2. N. Bourbaki, *Lie groups and Lie algebras*, Chapters 3–6, Springer-Verlag, Berlin,-New York (1989).
3. J. E. Humphreys, *Reflection groups and Coxeter groups*, Cambridge University Press, Cambridge (1990).
4. A. Klimyk, J. Patera, *Orbit functions*, SIGMA, **2**, 006 (2006), 60 pp.; DOI:10.3842/SIGMA.2006.006.
5. A. Klimyk, J. Patera, *Antisymmetric orbit functions*, SIGMA, **3**, 023 (2007), 83 pp.; DOI:10.3842/SIGMA.2007.023.
6. R. V. Moody, L. Motlochová, J. Patera, *Gaussian cubature arising from hybrid characters of simple Lie groups*, J. Fourier Anal. Appl., **20**, 1257–1290 (2014); DOI: 10.1007/s00041-014-9355-0.
7. M. Szajewska, A. Tereszkiewicz, *Multidimensional hybrid boundary value problem*, Acta Polytechnica **58**, № 6, 402–413 (2018). DOI: 10.14311/AP.2018.58.0402
8. J. Hrivn'k, L. Motlochová, *Dual-root lattice discretization of Weyl orbit functions*, J Fourier Anal Appl., **25**, 2521–2569 (2019); DOI: 10.1007/s00041-019-09673-1.
9. M. Nesterenko, J. Patera, *Three-dimensional C-, S- and E-transforms*, J. Phys. A, **41**, 475205 (2008), 31 pp.; DOI: 10.1088/1751-8113/41/47/475205.
10. M. Nesterenko, J. Patera, M. Szajewska, A. Tereszkiewicz, *Orthogonal polynomials of compact simple Lie groups: Branching rules for polynomials*, J. Phys. A, **43**, 495207 (2010), 27 pp.; DOI: 10.1088/1751-8113/43/49/495207.
11. M. Nesterenko, J. Patera, A. Tereszkiewicz, *Orthogonal polynomials of compact simple Lie groups*, Int. J. Math. Math. Sci., **2011**, 969424 (2011), 23 pp.; DOI: 10.1155/2011/969424.
12. M. Bodner, E. Bourret, J. Patera, M. Szajewska, *Icosahedral symmetry breaking: C₆₀ to C₇₈, C₉₆ and to related nanotubes*, Acta Cryst. A, **70**, 650–655 (2014); DOI: 10.1107/S2053273314017215.

Одержано 25.01.22