Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. А. Артамонов, С. Санчес, О группах симметрий квазикристаллов, *Матем. заметки*, 2010, том 87, выпуск 3, 323–329

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm5185>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 34.239.49.27

26 апреля 2023 г., 03:01:10

О группах симметрий квазикристаллов

В. А. Артамонов, С. Санчес

В работе исследуются связи между двумя видами групп симметрий квазикристаллов в модели “среза и проекции” квазикристаллов.

Библиография: 14 названий.

Введение. Группы симметрий играют важную роль в кристаллографии. Построенные в последние 30 лет новые металлические сплавы, например, $Al_{0,86}Mn_{0,14}$, найденный в 1984 г., обладают симметриями поворотов на угол $2\pi/5$, недопустимыми в классической теории симметрий кристаллов.

В настоящей работе в качестве модели Q для квазикристаллов используется метод *среза и проекции*. Вводятся группа собственных симметрий $\text{Sym}_W Q$ квазикристалла Q , зависящая от окна W , и общая группа симметрий Sym , содержащая собственную группу $\text{Sym}_W Q$ в качестве подгруппы. Цель работы – установить связь между этими группами, а также указать условия, при которых подгруппа общей группы симметрий содержится в собственной группе симметрий.

В заключение приводятся другие математические модели квазикристаллов и их группы симметрий. Показывается, что во второй модели мы приходим к тому же классу групп симметрий, что и в модели среза и проекции.

1. Модель “среза и проекции”. Имеются различные математические модели квазикристаллов и, соответственно, разные подходы к определению симметрий [1]–[8]. Приведем наиболее принятую схему математической модели *среза и проекции* построения квазикристалла, предложенную в работе [5].

Пусть V , U – конечномерные вещественные векторные пространства, $\dim U = d$, и M – дискретная подгруппа в $E = U \oplus V$, причем факторгруппа E/M компактна. Пространство E часто называется *гиперпространством*, пространство U – *физическим*, а пространство V – *фазовым*. Рассмотрим диаграмму проекций и вложения

$$\begin{array}{ccc} U & \xleftarrow{\pi} & E \xrightarrow{\rho} V \\ & & \cup \\ & & M \end{array}$$

Предполагается, что $\pi|_M$ инъективно и $\rho(M)$ плотно в V .

Непустое компактное выпуклое подмножество $W \subset V$ называется *окном* [5], если W является замыканием своей внутренней.

Так как $\rho(M)$ плотно в V , то $\rho(M) \cap W$ плотно в W .

Так как W является замыканием своей внутреннейности и $\rho(M) \cap W$ плотно в W , существует такая точка $A \in M$ и такой базис $e_1, \dots, e_n$ в решетке M , что образ “единичного” куба

$$K = \{A + \mu_1 e_1 + \dots + \mu_n e_n \mid 0 \leq \mu_i \leq 1\} \quad (1)$$

при проекции ρ лежит в W . В этом случае V как векторное пространство порождается элементами $\rho(e_1), \dots, \rho(e_n)$.

Положим $Q = \rho^{-1}(W) \cap M$. Множество $\pi(Q)$ называется множеством *среза и проекции* или *квазикристаллом* в физическом пространстве U . Отметим, что π отображает Q инъективно в U и задает биекцию Q и $\pi(Q)$. Поэтому часто квазикристаллом называется также и множество Q .

Всюду в дальнейшем мы будем пользоваться фиксированным выбором W , A , $e_1, \dots, e_n$ с указанными выше свойствами. Отметим свойство этой модели, которое приведено в [9; гл. 6, § 6.3].

ТЕОРЕМА 1.1 [9]. Пусть Q , W , U , E как и выше и S – конечное подмножество в Q , причем $\rho(S)$ принадлежит внутреннейности W . Для любого числа $T > 0$ существует такой вектор $x \in M$, что длина $\pi(x)$ больше T и $S + x \in Q$.

2. Симметрии квазикристаллов. В отличие от кристаллов в основу определения групп симметрий квазикристаллов положим аффинные преобразования векторных пространств. Если Ψ – аффинное преобразование векторного пространства E , то найдется такой обратимый линейный оператор ψ в E , что для всех $B, x \in E$ выполнено равенство

$$\Psi(B + x) = \psi(x) + b, \quad (2)$$

где $b \in E$. Оператор ψ является дифференциалом $d\Psi$ аффинного преобразования Ψ , причем отображение d , сопоставляющее Ψ его дифференциал $d\Psi$, задает гомоморфизм группы $\text{Aff } E$ всех аффинных преобразований пространства E в группу $\text{GL}(E)$ всех обратимых линейных операторов в E .

Имеются разные способы определения группы симметрий квазикристалла Q , см. [4], [9]–[11]. Следуя [9; гл. 6, § 6.3] рассмотрим *собственную группу симметрий* $\text{Sym}_W Q$ квазикристалла Q , как группу аффинных преобразований пространства E , отображающих Q биективно на себя.

ТЕОРЕМА 2.1. Пусть $\Psi \in \text{Sym}_W Q$ имеет представление (2), где $B = A$ – выбранная выше точка из Q . Тогда $b = \Psi(A) \in Q$. Кроме того, “физическое” подпространство U инвариантно относительно дифференциала $d\Psi$. Решетка M инвариантна относительно преобразования Ψ .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Так как $A \in Q$ и $\Psi \in \text{Sym}_W Q$, то (2) влечет

$$\Psi(A) = \psi(0) + b = b \in Q \subset M.$$

Без ограничения общности можно считать, что E является евклидовым пространством, причем $V \perp U$. Если $x \in U$ имеет в базисе $e_1, \dots, e_n$ координаты $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, то

$$x = \lambda_1 e_1 + \dots + \lambda_n e_n = y - z$$

где

$$y = k_1 e_1 + \dots + k_n e_n, \quad z = \mu_1 e_1 + \dots + \mu_n e_n.$$

Здесь k_i – наименьшее целое число с условием $k_i \geq \lambda_i$ и $0 \leq \mu_i < 1$.

Заметим, что

$$\rho(A + y) = \rho(A) + \rho(y) = \rho(A) + \rho(x + z) = \rho(A) + \rho(z) = \rho(A + \mu_1 e_1 + \dots + \mu_n e_n) \in W.$$

Следовательно, $A + y \in Q$.

Если $\Psi \in \text{Sym}_W Q$, то $\Psi(A + y) \in Q$. Кроме того, куб K из (1) с вершиной A переходит в параллелепипед $\Psi(K)$ с вершиной $\Psi(A)$. Поскольку вершины K лежат в Q , то и вершины $\Psi(K)$ также лежат в Q . Следовательно, $\rho(\Psi(K)) \subseteq W$. Кроме того,

$$\begin{aligned} d(\Psi)(x) &= d(\Psi)(y) - d(\Psi)(z) \\ &= \Psi(A + y) - \Psi(A + z) = \Psi(A + y) - \Psi(A + \mu_1 e_1 + \dots + \mu_n e_n), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Psi(A + y) \in Q$. Следовательно, в силу (3) при проекции ρ вектор $d(\Psi)(x)$ попадает в $W - W$ и поэтому расстояние от $d(\Psi)(x)$ до U не превосходит диаметра множества $W - W$.

Пусть $d(\Psi)(x) = l_0 + l_1$, где $l_0 \in U$ и $l_1 \in V = U^\perp$. Для любого вещественного числа λ имеем $d(\Psi)(\lambda x) = \lambda l_0 + \lambda l_1$. Следовательно, если $l_1 \neq 0$, то расстояние между $d(\Psi)(\lambda x)$ и U может быть сколь угодно большим, что невозможно. Поэтому $l_1 = 0$ и утверждение доказано.

ТЕОРЕМА 2.2. *Окно W инвариантно относительно ограничения $\rho\Psi|_V$ на подпространство V произведения преобразований $\rho\Psi$, где $\Psi \in \text{Sym}_W Q$. Отображение ρ^* , переводящее $\Psi \in \text{Sym}_W Q$ в $\rho\Psi|_V$, является гомоморфизмом групп. Группа $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$ относительно компактна и изоморфна группе своих дифференциалов. В частности, если W – выпуклый многогранник, то группа $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$ конечна.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Так как $\rho(Q)$ всюду плотно в W , достаточно показать, что $(\rho\Psi\rho)(x) \in W$ для любого $x \in Q$. Поскольку $\rho(x) = x + u$, $u \in U$,

$$(\rho\Psi\rho)(x) = (\rho\Psi)(x + u) = (\rho\Psi)(x) + \rho(d\Psi)(u) = (\rho\Psi)(x) \in W \quad (4)$$

в силу теоремы 2.1, так как $\Psi(x) \in Q$.

Пусть $\Psi, \Omega \in \text{Sym}_W Q$. Если $x \in Q$, то достаточно показать, что $\rho\Psi\rho\Omega\rho(x) = \rho\Psi\Omega\rho(x)$. Как и выше $\rho\Omega(x) = \Omega(x) + u$, $u \in U$. Отсюда по (4) и теореме 2.1

$$\rho\Psi\rho\Omega\rho(x) = \rho\Psi\rho\Omega(x) = \rho\Psi(\Omega(x) + u) = \rho\Psi\Omega(x) + \rho[(d\Psi)(u)] = \rho\Psi\Omega(x) = \rho\Psi\Omega\rho(x).$$

Если $e_i \in Q$ – элемент базиса решетки M и $\Psi \in \text{Sym}_W Q$, то в силу (4) получаем $\rho\Psi\rho(A + e_i) = \rho\Psi(A + e_i)$, $\rho\Psi\rho(A) \in W$. Так как линейная оболочка $\rho(e_1), \dots, \rho(e_n)$ равна V , все элементы матриц $d(\rho\Psi)$, где $\Psi \in \text{Sym}_W Q$, а также координаты вектора $\rho\Psi(A)$ ограничены. Поэтому группа $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$ относительно компактна.

Если W является многогранником, то каждое аффинное преобразование из группы $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$ однозначно определяется образами вершин, число которых конечно. Следовательно, группа $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$ конечна.

СЛЕДСТВИЕ 2.1. *Существует такая внутренняя точка $F \in W$, что разность $\Psi(F) - F \in U$ для любого $\Psi \in \text{Sym}_W Q$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Применить [12; лемма о неподвижной точке, с. 460] для внутрениности W и группы $\rho^*(\text{Sym}_W Q)$.

Следуя теореме 2.1 введем группу симметрий Sym квазикристалла Q как подгруппу группы $\text{Aff } E$ всех аффинных преобразований пространства E , состоящую из всех таких преобразований Ψ , что решетка M инвариантна относительно Ψ , а физическое пространство U инвариантно относительно дифференциала $d\Psi$. В силу теоремы 2.1 группа $\text{Sym}_W Q$ является подгруппой группы Sym . Легко видеть, что Sym является дискретной подгруппой аффинной группы. Для обеих групп $\text{Sym}_W Q$, Sym группы линейных операторов $d(\text{Sym}_W Q)$, $d(\text{Sym})$ называются *точечными*.

Применяя доказательство теоремы 2.2, получаем, что справедлива

ТЕОРЕМА 2.3. *Отображение $\rho^*: \Psi \rightarrow \rho\Psi|_V$ является гомоморфизмом группы Sym в группу аффинных преобразований пространства V .*

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 2.1. *Пусть Ψ – аффинное преобразование в E , причем M, U инвариантны относительно Ψ . Тогда $\Psi \in \text{Sym}$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть Ψ имеет представление (2). Тогда $b = \Psi(A) \in M \cap U$. Поэтому если $x \in U$, то $(d\Psi)(x) = \Psi(A + x) - b \in U$.

СЛЕДСТВИЕ 2.2. *Пусть G – подгруппа группы Sym . Предположим, что для каждого элемента g группы G существует такой вектор $x \in E$, что g -орбита x ограничена. В частности, это выполнено, если G либо периодическая, либо компактная группа. Тогда G изоморфна подгруппе соответствующей точечной группы.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Достаточно заметить, что группа G имеет тривиальное пересечение с подгруппой сдвигов.

Основным результатом работы [11] является описание конечных подгрупп G в группе Sym в случае, когда $\dim U = 2$, $\dim E = 4$. Предположим, что группа G не является точечной группой кристалла из [9; гл. 2]. Тогда G является подгруппой прямого произведения двух групп диэдра $\mathbf{D}_{k_1} \times \mathbf{D}_{k_2}$, где

- (1) $k_1 = k_2 = 10$;
- (2) $k_1 = 5$, $k_2 = 10$ или $k_1 = 10$, $k_2 = 5$;
- (3) $k_1 = k_2 = 8$;
- (4) $k_1 = k_2 = 12$.

В каждом из этих случаев G принадлежит одному из типов:

- а) циклическая группа $\langle B \rangle$;
- б) прямое произведение двух циклических групп $\langle B \rangle \times \langle a \rangle$;
- с) полупрямое произведение нормальной подгруппы из предыдущего случая и циклической группы порядка 2;
- д) диэдральная группа $\mathbf{D}_{10}$ в случае (2).

Указано матричное ортогональное представление каждой из этих групп в четырехмерном гиперпространстве E .

Рассмотрим вопрос о том, какие подгруппы симметрий Sym лежат в $\text{Sym}_W Q$.

ТЕОРЕМА 2.4. *Пусть G – подгруппа в группе Sym , причем группа $\rho^*(G)|_V$ относительно компактна. Тогда существует такое окно $W \subset V$, что $G \subseteq \text{Sym}_W Q$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Выберем точку $A \in M$ и базис $e_1, \dots, e_n$ решетки M . Рассмотрим куб K из (1). Обозначим через W замыкание в V выпуклой оболочки орбиты $\rho(K)$ при действии группы $\rho^*(G)|_V$. Тогда W является окном и $\rho^{-1}(W) \cap M$ инвариантно относительно действия группы G .

3. Другие модели. В этом пункте мы рассматриваем другие математические модели квазикристаллов. Рассмотрим сначала модель из работы [4].

Под *квазирешеткой* в вещественном евклидовом пространстве V понимается аддитивная конечно порожденная абелева подгруппа M в V , причем линейная оболочка M совпадает с V . Предполагается, что ранг M больше размерности пространства V . В этом случае имеется естественное сюръективное линейное отображение $\rho: E = \mathbb{R} \otimes_{\mathbb{Z}} M \rightarrow V$. Получаем коммутативную диаграмму

$$\begin{array}{ccc} & M & \\ \mu \swarrow & & \searrow \xi \\ E & \xrightarrow{\rho} & V \end{array}$$

где μ, ξ – вложения M в E и в V .

В работах [4], [7] группы симметрий квазикристаллов являются подгруппами G группы изометрий пространства V , сохраняющих квазирешетку M . Следующая теорема показывает, что класс групп симметрий G в смысле работ [4], [7] содержится в классе подгрупп групп симметрий Sym , рассмотренных в предыдущем пункте, причем V становится фазовым пространством, а $U = \ker \rho$ – физическим.

ТЕОРЕМА 3.1. *Для группы симметрий G в указанном выше смысле существует подгруппа H группы аффинных преобразований пространства E со следующими свойствами:*

- 1) *подпространство $U = \ker \rho$ инвариантно относительно H ;*
- 2) *решетка $\mu(M) \simeq M$ является H -инвариантной;*
- 3) *линейное отображение π индуцирует изоморфизм групп $\rho^*: H \rightarrow G$.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $e_1, \dots, e_n$ – базис абелевой группы M . В системе векторов $\xi(e_1), \dots, \xi(e_n) \in V$ выберем максимальную независимую подсистему. Можно считать, что она имеет вид

$$\xi(e_1), \dots, \xi(e_r), \quad r \leq n.$$

Тогда

$$\xi(e_i) = \alpha_{i1}\xi(e_1) + \dots + \alpha_{ir}\xi(e_r), \quad r+1 \leq i \leq n, \quad \alpha_{ij} \in \mathbb{R}. \quad (5)$$

Поэтому $\ker \pi$ как векторное пространство порождается элементами

$$\mu(e_i - \alpha_{i1}e_1 - \dots - \alpha_{ir}e_r), \quad r+1 \leq i \leq n,$$

возникающими из (5). Если $\Psi \in G$, то для любого индекса $i = 1, \dots, n$ имеем

$$\Psi(\xi(e_i)) = \sum_{j=1}^n \beta_{ij}\xi(e_j) + \xi(b_i), \quad \beta_{ij} \in \mathbb{Z}, \quad b_i \in M. \quad (6)$$

При этом Ψ аннулирует все элементы (5).

Зададим в E аффинное отображение $\bar{\Psi}$ по формулам

$$\bar{\Psi}(\mu(e_i)) = \sum_{j=1}^n \beta_{ij} \mu(e_j) + \mu(b_i), \quad \beta_{ij} \in \mathbb{Z}, \quad b_i \in M,$$

из (6). Это задание корректно, поскольку $E = \mathbb{R} \otimes_{\mathbb{Z}} M$. Кроме того, $\bar{\Psi}$ будет сохранять $\ker \rho$, так как $\rho \bar{\Psi} = \Psi \rho$. Из способа задания $\bar{\Psi}$ вытекает, что соответствие $\Psi \mapsto \bar{\Psi}$ является изоморфизмом групп.

Напомним теперь модель квазикристалла из работы [7]. Пусть L – квазирешетка в евклидовом (фазовом) пространстве V . *Квазикристаллом* называется функция $\hat{\rho}: L \rightarrow \mathbb{C}$, где $\mathbb{C}$ – поле комплексных чисел, причем L как абелева группа порождается носителем $\hat{\rho}$, т.е. элементами $x \in L$, для которых $\hat{\rho}(x) \neq 0$. *Калибровочной* функцией на L называется элемент из $\hat{L} = \text{hom}(L, \mathbb{R}/\mathbb{Z})$. Два квазикристалла $\hat{\rho}_1, \hat{\rho}_2$ неразличимы, если существует такая калибровочная функция χ на L , что

$$\hat{\rho}_2(x) = \exp(2\pi i \chi(x)) \hat{\rho}_1(x) \quad \text{для всех } x \in L.$$

Симметрией квазикристалла $\hat{\rho}$ называется такой ортогональный оператор g , что

- 1) квазирешетка L инвариантна относительно g ,
- 2) $\hat{\rho} \circ g$ и $\hat{\rho}$ неразличимы, т.е. $\hat{\rho}(g(x)) = \exp(2\pi i \chi_g(x)) \hat{\rho}(x)$ для некоторой калибровочной функции χ_g и для всех $x \in L$.

Несложно показывается, что отображение $g \mapsto \chi_g$ из условия 2) является 2-коциклом и все симметрии образуют подгруппу в группе ортогональных операторов.

Под *точечной группой* G понимается группа всех симметрий g . *Пространственной группой* квазикристалла $\hat{\rho}$ называется расширение G с помощью $\text{hom}_{\mathbb{Z}}(L, \mathbb{Z})$. С точки зрения теоремы 3.1 точечные группы являются подгруппами групп симметрий, рассмотренных выше.

Для полноты картины приведем модификацию модели из работы [8].

Группа Γ аффинных преобразований вещественного конечномерного пространства E называется *кристаллографической*, если

- 1) группа Γ *собственно разрывна*, т.е. для любого компакта D в E множество всех таких $\gamma \in \Gamma$, что пересечение $\gamma(D) \cap D$ непусто, является конечным;
- 2) существует такой компакт K_0 в E , что $E = \bigcup_{\gamma \in \Gamma} \gamma(K_0)$.

Если задана кристаллографическая группа G и конечное подмножество X в E , то квазикристаллом называется G -орбита X , т.е. множество $\{gx \mid g \in G, x \in X\}$. В качестве группы симметрий берется группа всех аффинных преобразований пространства, переводящая квазикристалл в себя. Ясно, что G содержится в этой группе симметрий.

Обобщая теорему Шефнлиса–Бибераха, Ауслендер выдвинул следующую гипотезу.

ГИПОТЕЗА 3.1. *Кристаллографическая группа почти разрешима.*

Обзор результатов по гипотезе 3.1 приведен в [13]. Там же приведено решение для двумерного случая. Положительное решение в трехмерном случае получено в [14].

Авторы выражают глубокую благодарность рецензенту за многочисленные полезные советы и критические замечания.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] G. Aragon, J. L. Aragon, F. Davila, A. Gomez, M. A. Rodriguez, “Modern geometric calculations in crystallography”, *Geometric Algebra with Applications in Science and Engineering* (Ixtapa-Zihuatanejo, 1999), Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2001, 371–386.
- [2] J. Hermisson, Ch. Richard, M. Baake, “A guide to the symmetry structure of quasiperiodic tiling classes”, *J. Physique I*, **7**:8 (1997), 1003–1018.
- [3] C. Janot, *Quasicrystals. A Primer*, Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [4] Ле Тханг Ты Куок, С. А. Пиунин, В. А. Садов, “Геометрия квазикристаллов”, *УМН*, **48**:1 (1993), 41–102.
- [5] R. V. Moody, “Model sets: a survey”, *From Quasicrystals to More Complex Systems* (Les Houches, 1998), Springer-Verlag, Berlin, 145–166; [arXiv: math.MG/0002020](#).
- [6] P. A. B. Pleasants, “Designer quasicrystals: cut-and-project sets with pre-assigned properties”, *Directions in Mathematical Quasicrystals*, CRM Monogr. Ser., **13**, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 95–141.
- [7] B. N. Fisher, D. A. Rabson, “Applications of group cohomology to the classification of quasicrystal symmetries”, *J. Phys. A*, **36**:40 (2003), 10195–10214.
- [8] B. Loricant, Jun Luo, J. M. Thuswaldner, “Topology of crystallographic tiles”, *Geom. Dedicata*, **128** (2007), 113–144.
- [9] В. А. Артамонов, Ю. Л. Словохотов, *Группы и их приложения в физике, химии и кристаллографии*, Изд. центр “Академия”, М., 2005.
- [10] A. Janner, “Crystallographic symmetries of quasicrystals”, *Phase Trans.*, **43**:1–4 (1993), 35–47.
- [11] V. A. Artamonov, S. Sanchez, “Remarks on symmetries of 2D quasicrystals”, *Proceedings of the Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering* (CMMSE-2006) (Spain, September 21–25, 2006), Univ. Rey Juan Carlos, Madrid, 2006, 59–70.
- [12] Э. Б. Винберг, *Курс алгебры*, Факториал Пресс, М., 2002.
- [13] H. Abels, “Properly discontinuous groups of affine transformations: a survey”, *Geom. Dedicata*, **87**:1–3 (2001), 309–333.
- [14] D. Fried, W. M. Goldman, “Three-dimensional affine crystallographic groups”, *Adv. in Math.*, **47**:1 (1983), 1–49.

В. А. Артамонов

Московский государственный университет

им. М. В. Ломоносова

E-mail: artamon@mech.math.msu.su

Поступило

17.06.2008

Исправленный вариант

06.10.2009

С. Санчес

Universidad Rey Juan Carlos, Испания

E-mail: sergio.sanchez@urjc.es