# Квазикристаллы и их симметрии*

**В. А. АРТАМОНОВ**
*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова*
e-mail: artamon@mech.math.msu.su

УДК 512.544+512.535+512.817

**Ключевые слова:** группы, инверсные полугруппы, кристаллографические группы.

**Аннотация**

В обзоре излагаются результаты по симметриям кристаллов и некоторые результаты по построению математической теории квазикристаллов и их симметрий.

**Abstract**

*V. A. Artamonov, Quasicrystals and their symmetries*, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 10 (2004), no. 3, pp. 3—10.

This paper is a survey of results on symmetries of crystals and of some results on a mathematical approach to the theory of quasicrystals and their symmetries.

## Введение

Симметрии кристаллов играют важную роль в геометрической теории кристаллов, помогая классифицировать возможные расположения атомов в материалах. Полная классификация групп симметрий кристаллов была завершена в 30-х годах прошлого века. Но в 1984 годы был построен сплав $Al_{0,86}Mn_{0,14}$, имеющий икосаэдральную симметрию, не допускаемую предложенной классификацией. Новые металлические сплавы, обладающие некристаллографической симметрией, получили название квазикристаллов. В настоящем обзоре излагается подход к классификации квазикристаллов, называемый «cut and project method». Цель обзора — познакомить алгебраистов с новыми алгебраическими объектами, возникающими в кристаллографии.

## 1. Симметрии кристаллов

В этом разделе напоминаются основные понятие и результаты по классификации групп симметрий кристаллов.

Пусть $K$ — множество точек, занимаемых атомами в кристалле. Кристалл является твёрдым телом, расположенным в конечномерном евклидовом простран-

*Работа частично поддержана грантом РФФИ 03-01-00167 и грантом НШ-1910.2003.1.

*Фундаментальная и прикладная математика*, 2004, том 10, № 3, с. 3—10.

стве $E$ с метрикой $\|x-y\| = \sqrt{(x-y, x-y)}$. *Изометрией* в $E$ называется отображение $\Phi\colon E \to E$, сохраняющее расстояние между любыми двумя точками, т. е. $\|\Phi(x)-\Phi(y)\| = \|x-y\|$ для всех $x, y \in E$. Все изометрии пространства $E$ образуют группу $\operatorname{Iso} E$ относительно умножения отображений.

**Теорема.** *Преобразование $\Phi$ евклидова пространства $E$ является изометрией в том и только в том случае, если существуют ортогональный линейный оператор $\phi$ в $E$, называемый* дифференциалом $d\Phi$ *отображения $\Phi$, и вектор $a \in E$, такие что $\Phi(x) = \phi(x) + a$ для всех $x \in E$. В частности, $\Phi$ биективно.*

Так как $K$ является твёрдым телом, то под группой симметрий $\operatorname{Sym} K$ понимается множество всех таких изометрий $\Phi$ пространства $E$, что $\Phi(K) = K$.

**Определение 1 ([1]).** Подмножество $K$ в евклидовом пространстве $E$ называется *кристаллическим*, если группа его симметрий $\operatorname{Sym} K$ обладает следующими свойствами:

1) для любой точки $A \in E$ существует такое положительное вещественное число $d(A)$, что если $\|\Phi(A) - A\| < d(A)$ для некоторой симметрии $\Phi \in \operatorname{Sym} K$, то $\Phi(A) = A$;
2) существует такое положительное вещественное число $D$, что для любых двух точек $A, B \in E$ найдётся такая симметрия $\Psi \in \operatorname{Sym} K$, что $\|\Psi(A) - B\| < D$.

Напомним, что подгруппа $L$ аддитивной группы пространства $E$ размерности $n$ называется *решёткой*, если $L$ как свободная абелева группа имеет базис, состоящий из $n$ векторов, независимых над $\mathbb{R}$. Это означает, что $E = \mathbb{R} \otimes_{\mathbb{Z}} L$ и $L$ является дискретной подгруппой в $E$.

**Теорема 1 (Шёнфлис, Бибербах).** *Пусть $\Gamma = \operatorname{Sym} K$ — группа симметрий кристаллического множества $K \subset E$ и $N = N(\Gamma)$ — подмножество всех переносов, принадлежащих группе $\operatorname{Sym} K$. Тогда $N \lhd \Gamma$ и фактор-группа $\Delta = \operatorname{Sym} K/N = d(\operatorname{Sym} K)$ конечна. Подгруппа $A(\Gamma)$ в аддитивной группе пространства $E$, состоящая из всех векторов $\{f(0) \in E \mid f \in N\}$, является решёткой в $E$, где $0$ — нулевой вектор.*

Конечная подгруппа $\Delta$ из предыдущей теоремы называется *точечной* группой.

**Теорема 2.** *Пусть точечная группа $\Delta$ является подгруппой в группе ортогональных матриц $\mathrm{O}(2, \mathbb{R})$. Тогда $\Delta$ является подгруппой в группе диэдра $\mathbf{D}_n$, где $n = 4, 6$.*

**Теорема 3.** *Единственными точечными подгруппами $\Delta$ в специальной ортогональной группе $\mathrm{SO}(3, \mathbb{R})$ являются следующие группы:*

1) *подгруппа в группе диэдра $\mathbf{D}_n$, где $n = 4, 6$;*
2) *группа вращений тетраэдра $T \simeq \mathbf{A}_4$;*
3) *группа вращений октаэдра $O \simeq \mathbf{S}_4$;*
4) *группа вращений икосаэдра $I \simeq \mathbf{A}_5$.*

Обозначим через $j$ центральную симметрию в трёхмерном пространстве, т. е. $j(x) = -x$ для любого вектора $x$. Предположим, что $\Delta$ — конечная подгруппа в ортогональной группе $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$, причём $\Delta$ не содержится в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Тогда $G = \Delta \cap \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$ является подгруппой индекса 2 в $\Delta$. Если $j \in \Delta$, то $\Delta = G \times \langle j \rangle_2$.

Предположим, что $j \notin \Delta$ и $\Delta \setminus G = jM$, где $M$ — подмножество в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Легко видеть, что $GM = MG = M$, $M^2 = G^2 = G$. В частности, $H = G \cup M$ является подгруппой в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, а $G$ — подгруппой индекса 3 в $H$. В этом случае группа $\Delta = G \cup jM$ обозначается $(H, G)$.

Из теоремы 3 вытекает следующее утверждение.

**Теорема 4.** *Пусть $\Delta$ — конечная точечная подгруппа в группе $\mathrm{O}(3,\mathbb{R})$, причём $\Delta$ не лежит в $\mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$. Тогда $\Delta$ — одна из следующих групп*:

1) $\langle a \rangle_n \times \langle j \rangle_2$, *где* $n = 1, 2, 3$;
2) $\mathbf{D}_n \times \langle j \rangle_2$, *где* $n = 2, 3, 4, 6$;
3) $T \times \langle j \rangle_2$;
4) $O \times \langle j \rangle_2$;
5) $I \times \langle j \rangle_2$;
6) $(\langle a \rangle_{2n}, \langle a^2 \rangle_n)$, *где* $n = 1, 2, 3$;
7) $(\mathbf{D}_n, \langle a \rangle_n)$, *где* $n = 2, 3, 4, 6$;
8) $(\mathbf{D}_{2n}, \mathbf{D}_n)$, *где* $n = 2, 3$;
9) $(O, T)$.

*Всего 32 кристаллографических класса в 7 сингониях.*

## 2. Квазикристаллы

В химии под квазикристаллом понимается металлический сплав, у которого дифракционная картина обладает некристаллической симметрией. Построенный в 1984 первый квазикристалл $\mathrm{Al}_{0{,}86}\mathrm{Mn}_{0{,}14}$ имеет икосаэдральную симметрию, открытую ранее в математике Пенроузом [6]. В настоящем обзоре мы изложим математический подход к построению квазикристаллов.

Квазикристалл $Q$ расположен в «физическом» пространстве $U$ размерности $d$, причём $U$ является подпространством в «гиперпространстве» $E$, которое является евклидовым пространством размерности $n > d$. В частности, $E$ имеет ортогональное разложение $E = U \oplus U^{\perp}$, причём $U, U^{\perp} \neq 0$. Подпространство $U^{\perp}$ называется *фазовым*. Если $x \in E$, то $x = y + z$, где $y \in U$ и $z \in U^{\perp}$. Определим соответствующую ортогональную проекцию $\mathcal{P}\colon E \to U$, полагая $\mathcal{P}(x) = y$.

Предположим, что $M$ — решётка в пространстве $E$ с ортонормированным базисом $e_1, \ldots, e_n$. Положим

$$P = \left\{ \sum_{i=1}^{n} y_i e_i \mid 0 \leqslant y_i \leqslant 1 \right\} \tag{1}$$

и $K = (1 - \mathcal{P})P \subset U^{\perp}$.

**Определение 2.** *Квазикристаллом* $Q$ в $U$ называется образ $(U \oplus K) \cap M = (U + P) \cap M$ при ортогональной проекции $\mathcal{P}$.

Без ограничения общности можно считать, что $U^{\perp} \cap M = 0$. Это эквивалентно тому, что $\mathcal{P}\colon E \to U$ отображает $M$ инъективно в $U$. Поэтому $\mathcal{P}$ задаёт биекцию $(U \oplus K) \cap M$ и $Q$.

Для каждого $i = 1, \ldots, n$ имеем ортогональное разложение

$$e_i = u_i + v_i, \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{2}$$

где

$$u_i = \mathcal{P}(e_i), \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \tag{3}$$

и $(1 - \mathcal{P})(e_i) = v_i$ для $1 \leqslant i \leqslant n$. Несложно проверить, что $U$ является линейной оболочкой $\langle u_1, \ldots, u_n \rangle$ системы векторов $u_1, \ldots, u_n$ и, аналогично, $U^{\perp} = \langle v_1, \ldots, v_n \rangle$ — линейная оболочка векторов $v_1, \ldots, v_n$. Из разложения (2) следует, что $0 < \|u_i\| \leqslant 1$ для всех $1 \leqslant i \leqslant n$.

Каждый элемент $x \in Q$ имеет разложение

$$x = \sum_{i=1}^{n} x_i u_i, \quad x_i \in \mathbb{Z}. \tag{4}$$

Поэтому $Q$ является собственным подмножеством в свободной аддитивной абелевой подгруппе в $U$ с базой (3).

**Предложение 1.** *Вектор $x$ из* (4) *принадлежит $Q$ в том и только в том случае, если*

$$\sum_{i=1}^{n} x_i v_i = \sum_{i=1}^{n} y_i v_i$$

*для некоторых вещественных чисел $0 \leqslant y_i \leqslant 1$.*

Предположим, что векторы $v_1, \ldots, v_r$ составляют базис пространства $U^{\perp}$. Тогда для каждого $j > r$ получаем

$$v_j = v_1 h_{1j} + \ldots + v_r h_{rj}, \quad h_{ij} \in \mathbb{R}. \tag{5}$$

Обозначим $H$ матрицу

$$\begin{pmatrix} h_{1,r+1} & \ldots & h_{1,n} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ h_{r,r+1} & \ldots & h_{r,n} \end{pmatrix} \in \mathrm{Mat}(r \times d, \mathbb{R}). \tag{6}$$

Напомним, что *матрицей Грама* системы векторов $a_1, \ldots, a_m \in E$ называется квадратная матрица $\mathrm{Gram}(a_1, \ldots, a_m)$ размера $m$, в которой на месте $(i, j)$ строит скалярное произведение $(a_i \mid a_j)$. Всюду в дальнейшем $E_k$ обозначает единичную матрицу размера $k$.

**Предложение 2.** *Если векторы $v_1, \ldots, v_r$ составляют базис пространства $U^{\perp}$ и $H$ — матрица из* (6), *то*

$$E_n - \mathrm{Gram}(u_1, \ldots, u_n) = \begin{pmatrix} E_r \\ {}^tH \end{pmatrix} [E_r - \mathrm{Gram}(u_1, \ldots, u_r)] \begin{pmatrix} E_r & H \end{pmatrix}. \tag{7}$$

*Более того, для любого $k = 1, \dots, r$ имеем*

$$\det[E_k - \mathrm{Gram}(u_1, \dots, u_k)] > 0. \tag{8}$$

**Теорема 5.** *Квазикристалл $Q$ однозначно определяется системой векторов* (3).

Определение 2 квазикристалла $Q$ использует следующие данные: гиперпространство $E$ с ортогональным разложением $E = U \oplus U^{\perp}$, компакт $K \subset U^{\perp}$ и решётку $M$ в гиперпространстве $E$. Уточним теорему 5 и укажем способ восстановления $M$ и $K$. Для этого нам потребуется следующая теорема.

**Теорема 6.** *Пусть евклидово пространство $U$ является линейной оболочкой системы векторов $u_1, \dots, u_n$. Предположим, что существует такая матрица $H$ из* (6)*, что выполнены условия* (7), (8)*. Тогда существуют евклидово пространство $E$, содержащее $U$, и векторы* (2)*, составляющие ортонормированный базис в $E$. Более того, векторы $v_1, \dots, v_r$ составляют базис пространства $U^{\perp}$.*

**Теорема 7.** *Пусть задан квазикристалл $Q$. Тогда найдётся такое положительное число $\varepsilon$, что $\|x - y\| > \varepsilon$ для любых различных точек $x, y \in Q$.*

Из теорем 7 и 6 и (2) вытекает следствие 1.

**Следствие 1.** *Существует конечное число квазикристаллов $Q$, имеющих заданное пересечение с единичным шаром*

$$S = \{x \in U \mid \|u\| \leqslant 1\}.$$

Перейдём к рассмотрению свойства локальной повторяемости квазикристалла.

**Теорема 8 (локальная метрическая повторяемость).** *Предположим, что рассматриваются $Q$, $K$, $U$, $E$ из определения 2 и задано конечное подмножество $S$ в $(U \times K) \cap M$, обладающее окрестностью, лежащей в $U \times K$. Тогда для любого положительного вещественного числа $T$ найдётся такой вектор $x \in M$, что $\|x\| > T$ и $S + x \in (U \oplus K) \cap M$. В частности, найдётся такой вектор $x \in M$, что $\mathcal{P}(S) + \mathcal{P}(x) \subseteq Q$ и длина $\|\mathcal{P}(x)\|$ может быть сколь угодно большой.*

**Предложение 3.** *Пусть задано подпространство $L$ в $E$, содержащее $U^{\perp}$ и являющееся линейной оболочкой системы векторов $L \cap M$. Тогда $L \cap Q$ — квазикристалл в $L \cap U$.*

Приведём несколько проблем, связанных с определением квазикристалла.

**Проблема 1.** Пусть $D$ — компактное подмножество в $U$ и $F$ — конечное подмножество в $D$. Найти необходимые и достаточные условия того, что существует такой квазикристалл $Q$, что $Q \cap D = F$.

Напомним, что условия подобного вида затрагивались в теоремах 5 и 6 в случае, когда $D = S$ — единичный шар.

**Проблема 2.** Пусть $Q \subset U$ — квазикристалл. Найти «минимальный» компакт $D \subset U$, такой что $Q$ однозначно определяется $Q \cap D$.

# 3. Симметрии квазикристаллов

Изучение симметрий квазикристаллов играет важную роль в теории квазикристаллов, помогая строить новые материалы с заданными свойствами. Поскольку при ортогональной проекции $\mathcal{P}$ метрика не сохраняется, то расширим понятие симметрии и рассмотрим аффинные преобразования гиперпространства $E$.

**Определение 3.** Подгруппа $\Gamma$ в группе аффинных преобразований $\operatorname{Aff}(V)$ вещественного векторного пространства $V$ называется *кристаллографической*, если

1) $\Gamma$ *вполне разрывна*, т. е. для любого компакта $D$ в $V$ множество всех $\gamma \in \Gamma$, для которых непусто пересечение $\gamma(D) \cap D$, конечно;
2) существует такой компакт $K_0$ в $V$, что
$$V = \bigcup_{\gamma \in \Gamma} \gamma(K_0).$$

Обобщая теорему 1, Ауслендер [7] выдвинул следующую гипотезу.

**Гипотеза 1.** Кристаллографическая подгруппа $\Gamma$ в $\operatorname{Aff}(V)$ почти разрешима, т. е. в $\Gamma$ имеется разрешимая нормальная подгруппа.

Обзор результатов по гипотезе 1 приведён в [4]. В этой же работе содержится положительное решение проблемы в двумерном случае. Положительное решение в трёхмерном случае получено в [8]. В [5] анонсировано положительное решение для случая размерности $n \leqslant 6$.

Введём группу симметрий квазикристалла $Q$. Пусть $E = U \oplus U^{\perp}$, $K$, $\mathcal{P}$, $Q$ такие же, как и выше. *Группой симметрий* $\operatorname{Sym} Q$ называется подгруппа в $\operatorname{Aff} E$, состоящая из всех аффинных преобразований пространства $E$, отображающих $(K \times U) \cap M$ биективно на себя.

**Теорема 9.** *Пусть $\Phi \in \operatorname{Sym} Q$. Тогда «физическое» подпространство $U$ инвариантно относительно дифференциала $d\Phi$.*

**Проблема 3.** Является ли группа $\operatorname{Sym} Q$ кристаллографической?

В связи с теоремой 8 интересно рассмотреть аффинные преобразования пространства $E$, отображающие подмножества в $(K \times U) \cap M$ инъективно на подмножества из $(K \times U) \cap M$.

**Определение 4.** Моноид $S$ называется *инверсным*, если для любого элемента $x \in S$ существует, и притом единственный, такой элемент $x^{-1} \in S$, что $xx^{-1}x = x$, $x^{-1}xx^{-1} = x^{-1}$.

Пусть $X$ — непустое множество и $S(X)$ — множество всех биективных отображений $A \to B$, где $A$ и $B$ — подмножества в $X$, включая пустое подмножество. Если $\phi\colon A \to B$ и $\psi\colon C \to D$ — биективные отображения и $B \cap C$ непусто, то биективно отображение
$$\psi\phi|_{\phi^{-1}(B\cap C)}\colon \phi^{-1}(B \cap C) \to \psi(B \cap C).$$

Если же $B \cap C = \varnothing$, то $\psi\phi = 0$, где $0$ — тождественное отображение $\{\varnothing\}$ в себя. Если $\phi\colon A \to B$ — биекция, то $\phi^{-1}\colon B \to A$ — обратное отображение. Идемпотентами в $S(X)$ являются тождественные отображения $1_A\colon A \to A$, где $A$ — произвольное непустое подмножество в $X$.

**Теорема 10 (Вагнер, Престон).** *Любой инверсный моноид вложи́м в инверсный моноид $S(X)$ для некоторого множества $X$.*

Пусть $E = U \oplus U^{\perp}$, $K$, $\mathcal{P}$, $Q$, как и выше. *Инверсным моноидом симметрий* $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ называется множество всех аффинных преобразований $\Phi$ в гиперпространстве $E$, отображающих (инъективно) подмножества в $(K \times U) \cap M$ в такие же подмножества. Тогда группа обратимых элементов в $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ совпадает с группой $\operatorname{Sym} Q$, введённой выше.

Каждый элемент моноида $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ задаёт биекцию $A \to B$ между подмножествами в $Q$. Поэтому $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$ вкладывается в инверсный моноид $S(Q)$.

Другой подход к определению группы симметрий $Q$ и к определению квазикристалла изложен в [3].

**Проблема 4.** Классифицировать с точностью до изоморфизма инверсные полугруппы вида $S^{\mathrm{Aff}}(Q)$.

**Проблема 5.** Классифицировать с точностью до изоморфизма группы симметрий квазикристаллов и их конечные подгруппы.

**Проблема 6.** Выяснить, любая ли конечная группа вложима в группу симметрий трёхмерного квазикристалла?

**Теорема 11.** *Пусть $a \in (U \oplus K) \cap M$ и некоторая окрестность точки $a$ в $E$ содержится в $U \oplus K$. Пусть $\Phi$ — аффинное преобразование в $E$, причём*

1) $\Phi(a) \in (U \oplus K) \cap M$;
2) *некоторая окрестность $\Phi(a)$ в $E$ также содержится в $U \oplus K$;*
3) *подпространство $U$ инвариантно относительно дифференциала $d\Phi$.*

*Тогда существует счётное множество таких элементов $p \in (U \oplus K) \cap M$, что $\Phi(p) \in (U \oplus K) \cap M$.*

В силу этой теоремы область определения почти любой симметрии из инверсного моноида симметрий квазикристалла счётна.

# Литература


[1] Делоне Б., Падуров Н., Александров А. — Математические основы структурного анализа кристаллов. — М.: ОНТИ, ГТТИ, 1934.

[2] Курош А. Г. Общая алгебра. Лекции 1969—1970 учебного года. — М.: Наука, 1974.

[3] Ле Ты Куок Тханг, Пиунихин С. А., Садов В. А. Геометрия квазикристаллов // Успехи мат. наук. — 1993. — Т. 48, № 1. — С. 41—102.

[4] Abels H. Properly discontinuous groups of affine transformations: a survey // Geom. Dedicata. — 2001. — Vol. 87. — P. 309—333.

[5] Abels H., Margulis G. A., Soifer G. A. Properly discontinuous groups of affine transformations with orthogonal linear part // C. R. Acad. Sci. Paris (I). — 1997. — Vol. 324. — P. 253—258.

[6] Aragón G., Aragón J. L., Davila F., Gomez A., Rodriguez M. A. Modern geometric calculations in crystallography // Geometric Algebra with Applications in Science and Engineering / Eds. E. Bayro Corrochano and G. Sobczyk. — Boston: Birkhäuser, 2001. — Chapter 18. — P. 371—386.

[7] Auslander L. The structures of compact locally affine manifolds // Topology. — 1964. — Vol. 3. — P. 131—139.

[8] Fried D., Goldman W. D. Three-dimensional affine crystallographic groups // Adv. Math. — 1983. — Vol. 47. — P. 1—49.

[9] Janner A. Crystallographic symmetries of quasicrystals // Phase Transitions. — 1993. — Vol. 43. — P. 35—47.

[10] Janot C. Quasicrystals: A Primer. — Oxford: Clarendon Press, 1994.