Аффинные группы симметрии в двумерных квазикристаллах

Б. А. ДОЛГИХ
Московский государственный индустриальный университет
e-mail: badolg@rol.ru

УДК 512.54

Ключевые слова: квазикристалл, симметрия квазикристалла, метод разрезов и проекций.

Аннотация

Статья посвящена математическому описанию возможных конечных аффинных групп симметрии в двумерных квазикристаллах.

Abstract

B. A. Dolgikh, Affine symmetry groups in 2D-quasicrystals, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 13 (2007), no. 2, pp. 117—122.

This paper is devoted to the mathematical description of possible finite affine symmetry groups in two-dimensional quasicrystals.

1. Введение

В основе математической теории кристаллографии лежит представление об упорядоченном периодическом расположении в кристалле составляющих его частиц, которые образуют кристаллическую решётку. Основной целью теории является выявление и классификация всех типов симметрии кристаллов. Описание симметрии кристалла задаётся его кристаллографической группой. Классификация всех плоских (двумерных) и пространственных (трёхмерных) кристаллографических групп была получена в конце XIX в. Е. С. Фёдоровым [3] и А. Шёнфлисом [6].

С середины XX в. в веществах разных классов были обнаружены области конденсированной фазы с пентагональной либо икосаэдрической симметрией, запрещённой для трёхмерного кристалла. В дальнейшем физиками были обнаружены материалы с осями симметрии восьмого, десятого и двенадцатого порядков, не являющиеся кристаллами. Твёрдые фазы с некристаллографическим упорядочиванием атомов были названы квазикристаллами [7]. Квазикристаллы характеризуются несоразмерной квазипериодической структурой, которая может обладать некристаллографической симметрией.

Фундаментальная и прикладная математика, 2007, том 13, № 2, с. 117—122.

Открытие квазикристаллов побудило к построению различных теорий квазикристаллов. В настоящее время общепринятого подхода к квазикристаллам не существует. Наиболее распространённым является рассмотрение квазикристаллов как трёхмерного образа некоторых периодических структур («гиперкристаллов»), заданных в n-мерном евклидовом пространстве с $n > 3$.

Целью настоящей статьи является описание возможных аффинных групп симметрии в двумерных квазикристаллах.

В основе математического описания симметрий кристаллов лежат следующие определения.

Определение 1. *Группой симметрий* $\mathrm{Sym}\, M$ множества M в евклидовом пространстве E называется множество всех таких движений пространства E, которые отображают множество M на себя.

Определение 2. Дискретная подгруппа A в аддитивной группе евклидова пространства E называется *решёткой* в E, если её ранг равен размерности пространства E.

Определение 3. Подгруппа Γ в группе движений $\mathrm{Iso}(E)$ евклидова пространства E называется *кристаллографической* или *пространственной группой*, если выполняются следующие условия:

1) её аддитивная подгруппа $A(\Gamma) \subset \Gamma$ является решёткой в E;
2) $\Gamma/A(\Gamma)$ является конечной группой в группе $\mathrm{O}(E)$ всех ортогональных преобразований евклидова пространства E.

Определение 4 (Делоне [2]). Подмножество K евклидова пространства E есть *кристалл*, если группа его симметрий $\mathrm{Sym}(K)$ удовлетворяет следующим условиям:

1) для данной точки A существует такое число $d(A) > 0$, что неравенство $\|\Phi(A) - A\| < d(A)$ для некоторого $\Phi \in \mathrm{Sym}\, K$ влечёт равенство $\Phi(A) = A$;
2) существует такое фиксированное положительное число $D > 0$, что для любых двух точек A, B можно найти преобразование $\Psi \in \mathrm{Sym}\, K$, для которого $\|\Psi(A) - B\| < D$.

Первое из этих условий представляет собой свойство *дискретности* кристалла. Второе — свойство *однородности*.

Утверждение 1.1 (Шёнфлис—Бибербах). *Группа симметрий кристалла K является кристаллографической.*

2. Симметрии квазикристаллов

Приведём определение квазикристалла так называемым методом *разрезов и проекций* [5].

Пусть евклидово пространство E размерности n имеет ортогональное разложение $E = U \oplus V$, где $\dim U = d < n$. Пространство E называется *гиперпространством*, U — *физическим* пространством, а $V = U^{\perp}$ — *фазовым* пространством. Пусть $e_1, \ldots, e_n$ — фиксированный ортонормированный базис в E. Тогда

$M = \mathbb{Z}e_1 \oplus \ldots \oplus \mathbb{Z}e_n$ является решёткой в E. Будем предполагать, что M имеет нулевое пересечение как с U, так и с V.

Рассмотрим единичный куб

$$P = \left\{ \sum_{i=1}^{n} x_i e_i \;\middle|\; 0 \leqslant x_i \leqslant 1 \right\}. \tag{1}$$

Ортогональную проекцию K куба P в фазовое пространство V назовём *окном*. *Квазикристалл* Q определяется как ортогональная проекция $M \cap (P+U)$ в физическое пространство U. При этом считается, что U так «повёрнуто» относительно базиса $e_1, \ldots, e_n$, что проекция M в U биективна. Кроме того, предполагается, что 0 принадлежит окну вместе с некоторой окрестностью.

Определение 5. *Симметрия квазикристалла* — это такое аффинное преобразование евклидова пространства E, которое отображает $M \cap (P+U)$ биективно в себя.

Симметрии квазикристалла образуют группу, обозначаемую $\operatorname{Sym} Q$ [1, гл. 6]. В [4] показано, что симметрии квазикристалла являются линейными операторами, при действии которых как U, так и M инвариантны. В [5] рассмотрен случай, когда $\dim U = \dim V = 2$. С помощью матричного представления симметрий классифицированы все возможные конечные подгруппы группы $\operatorname{Sym} Q$, причём под $\operatorname{Sym} Q$ в [5] понималась подгруппа группы $\mathrm{GL}(E)$ всех линейных обратимых операторов в E, таких что как U, так и M инвариантны при действии каждого элемента из $\operatorname{Sym} Q$. При этом было опущено требование биективности отображения множества $M \cap (P+U)$ при действии оператора симметрии. В дальнейшем под $\operatorname{Sym} Q$ будем понимать, как и в [1], подмножество в группе $\operatorname{Aff} E$, состоящую из таких аффинных преобразований Φ гиперпространства E, которыми множество $M \cap (P+U)$ биективно отображается на себя. Найдём конечные подгруппы в $\operatorname{Sym} Q$, которые могут существовать. Все эти подгруппы, очевидно, являются также подгруппами, перечисленными в [5].

3. Группы симметрии квазикристалла

Пусть A — матрица оператора $\mathcal{A} \in \operatorname{Sym} Q$ в фиксированном базисе $(e_1, \ldots, e_n)$, причём $A \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{Z})$.

Допустим, что $(u_1, \ldots, u_d)$ — базис в U, а $(u_{d+1}, \ldots, u_n)$ — базис в V. Предположим, что

$$(u_1, \ldots, u_n) = (e_1, \ldots, e_n)C, \quad C \in \mathrm{GL}(n, \mathbb{R}).$$

Пусть G — конечная подгруппа в $\operatorname{Sym} Q$ и $\mathcal{A} \in G$. Согласно [5] в E существуют скалярное произведение $[x, y]$ и обратимая матрица C, такие что

$$CAC^{-1} = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}, \quad A_1 \in \mathrm{O}(d, \mathbb{R}), \quad A_2 \in \mathrm{O}(n-d, \mathbb{R}).$$

Отображения $A \to A_1$, $A \to A_2$ определяют групповые гомоморфизмы

$$\mu_1 \colon \operatorname{Sym} Q \to \mathrm{O}(n-d, \mathbb{R}).$$

В этом случае G — подгруппа прямого произведения $\mu_1(G) \times \mu_2(G)$, где $\mu_1(G)$, $\mu_2(G)$ — конечные подгруппы в $\mathrm{O}(d, \mathbb{R})$ и $\mathrm{O}(n-d, \mathbb{R})$ соответственно. Пусть W — ортогональное дополнение U относительно $[x, y]$. Операторы из $\mu_1(G)$ действуют в U, а операторы из $\mu_2(G)$ действуют в проекции n-мерного единичного куба на подпространство W, в частности переводят проекцию множества $M \cap (P + U)$ на подпространство W в себя.

Утверждение 3.1. *Проекцией n-мерного куба на двумерную плоскость является $2m$-угольник с попарно параллельными сторонами, где $m = 2, \ldots, n$.*

Доказательство. Проведём индукцию по n.

Базис индукции: $n = 3$. Очевидно, что проекцией является либо прямоугольник, либо шестиугольник с попарно параллельными сторонами.

Шаг индукции. Пусть для $n \geqslant 3$ утверждение справедливо. Рассмотрим единичный куб P размерности n в евклидовом пространстве размерности $n + 1$, определяемый формулой (1). Единичный куб размерности $n+1$ получается из P процедурой прибавления векторов $x_{n+1} e_{n+1}$ $(0 \leqslant x_{n+1} \leqslant 1)$. При этом к проекции n-мерного куба прибавятся векторы $x_{n+1} u_{n+1}$, где u_{n+1} — проекция e_{n+1} на рассматриваемую плоскость. При этом если u_{n+1} параллелен какой-то паре выпуклого $2m$-угольника окна, то количество сторон проекции не изменится. Если нет, то увеличится на две. □

Предположим, что $n = 4$, $d = 2$. В этом случае окном может являться либо прямоугольник, либо шестиугольник, либо восьмиугольник. Но 0 может находиться внутри окна только в последних двух случаях.

Из [1, предложение 6.5] следует, что вершины многоугольника окна соответствуют элементам квазикристалла. А поскольку $\mu_2(G)$ — конечная подгруппа группы $\mathrm{O}(n-d, \mathbb{R})$, то она должна быть подгруппой группы симметрии многоугольника, так как ортогональные преобразования многоугольника (включая его внутренние точки) в себя обязаны переводить вершины в вершины. Максимально возможные группы симметрии могут реализоваться, если многоугольник окна правильный (в общем случае многогранник размерности $n-d$). В этом случае это подгруппы групп симметрии правильного шестиугольника и правильного восьмиугольника.

В силу сказанного аналогом теоремы 2.5 из [5] является в нашем случае теорема 3.1.

Теорема 3.1. *Пусть G — конечная подгруппа в $\operatorname{Sym} Q$, где $\dim U = 2 = \dim V$. Тогда G является подпрямым произведением одного из следующих трёх типов*:

а) *двух циклических групп $\langle a_1 \rangle_{k_1} \times \langle a_2 \rangle_{k_2}$;*

б) *циклической группы и группы диэдра $\langle a_1 \rangle_{k_1} \times D_{k_2}$;*

в) *двух групп диэдра $D_{k_1} \times D_{k_2}$.*

Целые k_1 *и* k_2 *удовлетворяют одному из следующих условий*:

1) $k_1, k_2 = 1, 2, 3, 4, 6$;
2) $k_1 = k_2 = 8$.

Напомним, что группа диэдра D_k является подгруппой группы ортогональных матриц $\mathrm{O}(2, \mathbb{R})$, порождённой двумя матрицами

$$a = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{k} & -\sin\frac{2\pi}{k} \\ \sin\frac{2\pi}{k} & \cos\frac{2\pi}{k} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Отметим, что

$$a^l = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi l}{k} & -\sin\frac{2\pi l}{k} \\ \sin\frac{2\pi l}{k} & \cos\frac{2\pi l}{k} \end{pmatrix}, \quad ba^l = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{k} & \sin\frac{2\pi}{k} \\ \sin\frac{2\pi}{k} & -\cos\frac{2\pi}{k} \end{pmatrix}.$$

Более детальную классификацию групп симметрии в случае 2) теоремы 3.1 даёт следующая теорема [5, теорема 2.14].

Теорема 3.2. *Пусть группа* G *является подпрямым произведением типа* а), б), в) *из теоремы* 3.1, *где* $k_1 = k_2 = 8$. *Тогда*

а) *если* G — *подпрямое произведение циклических групп* $\langle a_1 \rangle_8 \times \langle a_2 \rangle_8$, *то* G *является прямым произведением двух циклических групп* $\langle B \rangle \times \langle a_1^l \rangle$, *где*

$$B = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2^s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{k_1} & -\sin\frac{2\pi}{k_1} & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\pi}{k_1} & \cos\frac{2\pi}{k_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\frac{2\pi s}{k_2} & -\sin\frac{2\pi s}{k_2} \\ 0 & 0 & \sin\frac{2\pi s}{k_2} & \cos\frac{2\pi s}{k_2} \end{pmatrix},$$

причём s *нечётное*, $l = 0, 2, 4$;

б) *если* G — *подпрямое произведение* $\langle a_1 \rangle \times \mathrm{D}_8$, *то* G *образуется как полупрямое произведение нормальной подгруппы группы* $\langle B \rangle \times \langle a_1^l \rangle$ *и циклической группы* $\langle b \rangle$ *порядка* 2, *причём* s *в* B *нечётно*, $l = 0, 2, 4$ *и*

$$b = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

в) *если* G — *подпрямое произведение* $\mathrm{D}_8 \times \mathrm{D}_8$, *то* G *является одной из следующих групп*:

1) *полупрямое произведение нормальной подгруппы группы* $\langle B \rangle \times \langle a_1^l \rangle$ ($l = 2$ *и* s *чётное*) *и прямого произведения* $\langle b_1 \rangle_2 \times \langle b_2 \rangle_2$;
2) *полупрямое произведение нормальной подгруппы группы* $\langle B \rangle \times \langle a_1^l \rangle$ ($l = 2$ *и* s *чётное*) *и циклической группы* $\langle H \rangle_2$, *где*

$$H = \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_2 a_2^j \end{pmatrix}, \quad j = 0, \ldots, 8.$$

Сравнивая результаты настоящей работы с результатами [5], мы видим, что наложение дополнительного требования на оператор симметрии квазикристалла приводит к запрету на некоторые группы симметрии, перечисленные в [5]. Так, по [5, теорема 2.5] допускаются случаи, когда k_1, k_2 равны либо 5, либо 10 и когда $k_1 = k_2 = 12$. В подходе к определению симметрии квазикристалла, принятом в данной работе, требование биективности отображения множества $M \cap (P + U)$ на себя при действии оператора из $\operatorname{Sym} Q$ в гиперпространство E влечёт инвариантность проекции этого множества на фазовое пространство V. При этом в силу того что проекция единичного куба (1) на фазовое пространство V не может быть пятиугольником, а также в рассматриваемом нами случае $n - d = 2$ двенадцатиугольником, значения $k_1 = 5, 12$ исключаются. Разрешены только такие группы симметрии, подгруппами которых являются группы симметрии окна. Это циклические группы $\langle a_2 \rangle_{k_2}$ и группы диэдра D_{k_2} с $k_2 = 1, 2, 3, 4, 6, 8$, что и определяет приведённую выше классификацию групп симметрии квазикристалла в случае $\dim U = 2 = \dim V$.

Литература

[1] Артамонов В. А., Словохотов Ю. Л. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии. — М.: Академия, 2005.

[2] Делоне Б., Падуров Н., Александров А. Математические основы структурного анализа кристаллов. — М., 1949.

[3] Фёдоров Е. С. Симметрия и структура кристаллов. Основные работы. — М., 1949.

[4] Artamonov V. A. On symmetries of quasicrystals // Algebraic Structures and Their Representation: XV Colloquio Latinoamericano de Álgebra, Cocoyoc, Morelos, Mexico, July 20—26, 2003 / J. A. de la Pena, E. Vallejo, N. Atakishiev, eds. — Providence: Amer. Math. Soc., 2005. — (Contemp. Math.; Vol. 376). — P. 175—188.

[5] Artamonov V. A., Sanchez S. Remarks on symmetries of 2D-quasicrystals // Proc. of the Conf. on Computation and Mathematical Methods in Science and Engineering (CMMSE-2006), Univ. Rey Juan Carlos, Madrid, Spain, September 21—25, 2006. — P. 59—70.

[6] Schönflies A. Kristallsysteme und Kristallstruktur. — Leipzig, 1891.

[7] Shechtman D. et al. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry // Phys. Rev. Lett. — 1984. — Vol. 53. — P. 1951—1953.