Множества Делоне в $\mathbb{R}^3$: условие правильности*

Н. П. ДОЛБИЛИН
Математический институт
им. В. А. Стеклова РАН
e-mail: dolbilin@mi.ras.ru

УДК 514.15+514.17+514.8+548.1

Ключевые слова: множество Делоне, кристаллографическая группа, конечная группа, правильная система, кристалл, кластер.

Аннотация

Правильная система — это множество Делоне с транзитивной группой симметрий, или, другими словами, орбита некоторой точки относительно кристалллографической группы. Локальная теория правильных систем, созданная в геометрической школе Б. Н. Делоне, была призвана, в частности, строго доказать связь между «локальным» порядком и «глобальным» порядком, т. е. между устройством множества в окрестности каждой его точки и правильностью множества Делоне в целом. Основной результат статьи — это доказательство так называемой $10R$-теоремы о том, что идентичность окрестностей радиуса $10R$ в данном множестве Делоне ((r, R)-системе) в трёхмерном евклидовом пространстве влечёт правильность данного множества. Этот результат был получен и анонсирован давно независимо М. И. Штогриным и автором этой статьи, однако за исключением отдельных идей доказательство оставалось неопубликованным. В приводимом доказательстве $10R$-теоремы используются недавние результаты автора, которые несколько упрощают изложение.

Abstract

N. P. Dolbilin, Delone sets in $\mathbb{R}^3$: regularity conditions, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 21 (2016), no. 6, pp. 115—141.

A regular system is a Delone set in Euclidean space with a transitive group of symmetries or, in other words, the orbit of a crystallographic group. The local theory for regular systems, created by the geometric school of B. N. Delone, was aimed, in particular, to rigorously establish the "local-global-order" link, i.e., the link between the arrangement of a set around each of its points and symmetry/regularity of the set as a whole. The main result of this paper is a proof of the so-called $10R$-theorem. This theorem asserts that identity of neighborhoods within a radius $10R$ of all points of a Delone set (in other words, an (r, R)-system) in 3D Euclidean space implies regularity of this set. The result was obtained and announced long ago independently by M. Shtogrin and the author of this paper. However, a detailed proof remains unpublished for many years. In this paper, we give a proof of the $10R$-theorem. In the proof, we use some recent results of the author, which simplify the proof.

*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 14-11-00414).

Фундаментальная и прикладная математика, 2016, том 21, № 6, с. 115—141.

1. Основные определения и результаты

Математическая модель идеального кристалла представляет собой дискретное множество точек с кристалллографической группой симметрий. Кристаллографы, специалисты в физике твёрдого тела объясняют появление в аморфной среде при кристаллизации богатой группы симметрий («глобального порядка») в кристалле тем, что одноимённые атомы, «плавающие» в аморфном растворе или расплаве создают геометрически идентичные кластеры с минимальной энергией [5]. Локальная теория кристаллических систем была призвана найти и математически строго обосновать связь между геометрической идентичностью ограниченных кластеров в данном множестве и правильностью этого множества в целом. В первой работе [1] на эту тему был получен локальный критерий правильности множества Делоне. Обзор некоторых последующих результатов этой теории можно найти в [2, 8].

В этой статье мы приводим доказательство одного из центральных результатов этой теории для трёхмерного евклидова пространства, т. е. пространства, в котором «живут» реальные кристаллы. Оказывается, что для множества Делоне с параметрами r и R достаточно потребовать попарной идентичности (эквивалентности) окрестностей радиуса $10R$ (так называемых $10R$-кластеров), чтобы множество было правильной системой, т. е. множеством Делоне с транзитивной группой симметрий. Эта верхняя оценка $10R$ представляется несколько завышенной, но в действительности не слишком. Дело в том, что верхняя оценка для радиуса кластера не может быть ниже $6R$: для любого $\varepsilon > 0$ можно указать множество Делоне, у которого все $(6R-\varepsilon)$-кластеры попарно эквивалентны, но множество не является правильной системой.

Определение 1.1. Множество $X \subset \mathbb{R}^d$ называется *множеством Делоне* (с параметрами r и R, где $r, R > 0$), если для него выполняются два условия:

1) открытый d-шар $B_y(r)$ радиуса r с центром в *произвольной* точке $y \in \mathbb{R}^d$ содержит не более одной точки из X:

$$\#(B_y^o(r) \cap X) \leqslant 1;$$

2) замкнутый d-шар $B_y(R)$ радиуса R содержит не менее одной точки из X:

$$\#(B_y(R) \cap X) \geqslant 1.$$

Определение 1.2. *Правильная система* X — это множество Делоне, группа симметрий которого действует транзитивно на множестве, т. е. для любой пары точек x и x' из X найдётся движение g пространства $\mathbb{R}^d$, такое что $g(x) = x'$ и $g(X) = X$.

Определение 1.3. Пусть X — множество Делоне и для $x \in X$. Обозначим $C_x(\rho) := X \cap B_x(\rho)$. Будем говорить, что подмножество $C_x(\rho)$ есть *ρ-кластер* точки x во множестве X.

Подчеркнём, что мы различаем ρ-кластеры $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ разных точек $x \neq x'$ даже в том случае, когда сами кластеры разных точек совпадают как множества.

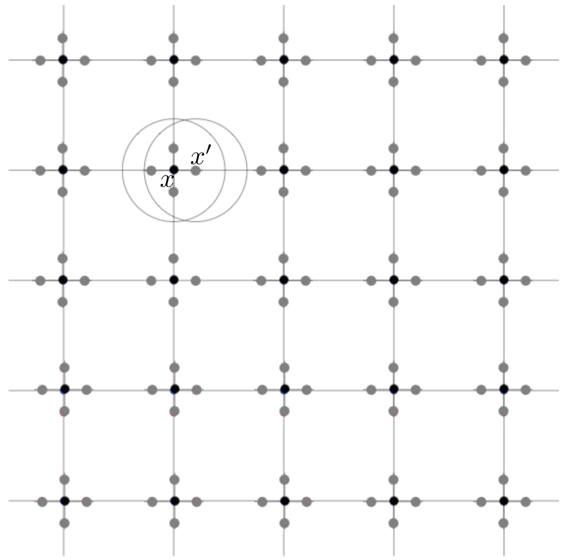

Рис. 1

На рис. 1 приведён пример множества Делоне, у которого кластеры одинакового радиуса для двух разных точек x и x' совпадают в теоретико-множественном смысле. Пусть $Y \subset \mathbb{R}^2$ такое, что $Y = \mathbb{Z}^2 + Y_0$, где $\mathbb{Z}^2$ — квадратная решётка и $Y_0 = \{(\pm a, 0),\ (0, \pm b\}$, $0 < a \leqslant b < 1/4$. Легко заметить, что если $a = b$, то Y — правильная система (см. рис. 1). Давайте рассмотрим $X = \mathbb{Z}^2 \cup Y$. В силу неравенства $a = b < 1/4$ множество X есть объединение двух правильных систем относительно одной и той же группы. Более того, для $a = b < 1/4$, $x = (m, n) \in \mathbb{Z}^2$ и $x' = (m + a, n) \in Y$ при $\rho = 2b$ имеем

$$C_x(2b) = X \cap B_x(2b) = X \cap B_{x'}(2b) = C_{x'}(2b),$$

т. е. в этом примере кластеры $C_x(2a)$ и $C_{x'}(2a)$ в теоретико-множественном смысле совпадают.

Наряду с кластером полезно иметь понятие ρ-оболочки.

Определение 1.4. Для данного $x \in X$ множество всех $x' \in X$ с условием $|xx'| = \rho$ назовём *ρ-оболочкой* в точке x и обозначим $H_x(\rho)$.

Заметим, что

$$C_x(\rho) = \bigcup_{0 \leqslant \rho' \leqslant \rho} H_x(\rho').$$

Разумеется, ρ-оболочка $H_x(\rho)$ непуста тогда и только тогда, когда существует точка $x' \in X$ с $|xx' = \rho|$.

Определение 1.5. Для $x, x' \in X$ и $\rho > 0$ два ρ-кластера $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ назовём *эквивалентными*, если существует движение g, такое что $g(x) = x'$ и $g\big(C_x(\rho)\big) = C_{x'}(\rho)$.

Из этого определения следует, что эквивалентные кластеры конгруэнтны, но обратное, вообще говоря, не верно. Обратимся к примеру на рис. 1. Кластеры $C_{x'}(2a)$ и $C_x(2a)$ совпадают в теоретико-множественном смысле, но они не эквивалентны, так как нет движения, переводящего x в x' и кластер $C_x(2a)$ в кластер $C_{x'}(2a)$.

Для данного множества Делоне X и для каждого $\rho > 0$ множество ρ-кластеров распадается в классы эквивалентных кластеров. Предположим, что для всех $\rho > 0$ множество классов ρ-кластеров конечно. В этом случае множество Делоне X называется множеством *конечного типа*.

Для множества Делоне X конечного типа *перечисляющая функция* $N(\rho)$ определяется как число классов ρ-кластеров для данного ρ. Легко заметить, что перечисляющая функция — это монотонно невозрастающая функция, принимающая целые положительные значения, непрерывная слева.

Основной вопрос локальной теории — определить *радиус правильности*, т. е. такое значение $\hat\rho = \hat\rho_d(R)$, что если для множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^d$ $N(\hat\rho) = 1$, то X — правильная система.

Обозначим через $S_x(\rho)$ *группу кластера* $C_x(\rho)$, т. е. группу таких симметрий s, что $s(x) = x$ и $s\big(C_x(\rho)\big) = C_x(\rho)$.

Отметим, что, вообще говоря, согласно условию $s(x) = x$ группа кластера $S_x(\rho)$ является собственной подгруппой группы всех симметрий множества точек, входящих в данный ρ-кластер. Легко указать примеры множеств Делоне, у которых ρ-кластеры при некоторых ρ как множество имеют группу симметрий, не обязательно оставляющих центр x на месте, которая содержит группу $S_x(\rho)$ как собственную подгруппу.

Ясно, что если ρ-кластеры $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ принадлежат одному классу, то их группы сопряжённые: $S_x(\rho) = g^{-1}S_{x'}(\rho)g$, где $g \in \mathrm{Iso}(d)$, $g(x) = x'$, (порядок выполнения операций в суперпозиции справа налево).

Для каждой точки x из множества Делоне X группа кластера $S_x(\rho)$ с ростом ρ не может расти, но только уменьшаться, т. е., вообще говоря, выполняется нестрогое включение: если $\rho < \rho'$, то $S_x(\rho) \supseteq S_x(\rho')$.

В [1] был доказан следующий локальный критерий правильности.

Теорема 1.1 (локальный критерий правильности). *Множество Делоне X является правильной системой тогда и только тогда, когда X удовлетворяет при некотором ρ_0 двум условиям:*

$$N(\rho_0 + 2R) = 1, \tag{1}$$

$$S_x(\rho_0) = S_x(\rho_0 + 2R). \tag{2}$$

Основной результат этой работы — доказательство следующей теоремы.

Теорема 1.2 ($10R$-теорема). *Множество Делоне X в трёхмерном пространстве $\mathbb{R}^3$ есть правильная система, если $10R$-кластеры всех точек из множества X попарно эквивалентны, т. е. если $N(10R) = 1$.*

2. Доказательство $10R$-теоремы

2.1. Вспомогательные утверждения

Докажем четыре леммы.

Лемма 2.1 (о множествах Делоне конечного типа). *Если перечисляющая функция $N(\rho)$ принимает конечное значение при $\rho = 2R$: $N(2R) < \infty$, то она конечна для любого $\rho > 0$, т. е. $N(2R) < \infty$ влечёт $N(\rho) < \infty$ для любого $\rho > 0$.*

Доказательство. Рассмотрим для множества X разбиение Делоне $\mathrm{Del}(X)$, и пусть St_x обозначает *звезду* разбиения в точке x, т. е. совокупность всех многогранников разбиения $\mathrm{Del}(X)$, которые сходятся в x. В силу r- и R-условий для множества Делоне X каждая звезда в разбиении состоит из ограниченного числа ячеек Делоне. Заметим, что всякая ячейка разбиения Делоне есть выпуклый многогранник, вписанный в «пустую» сферу, т. е. в сферу, не содержащую внутри точек из X. Так как радиус пустой сферы не превышает R, то все вершины любой ячейки из звезды St_x принадлежат кластеру $C_x(2R)$.

Для эквивалентных кластеров $C_x(2R)$ и $C_y(2R)$ соответствующие звезды St_x и St_y конгруэнтны. Поэтому ввиду $N(2R) < \infty$ существует конечное число неконгруэнтных звёзд. Поэтому в $\mathrm{Del}(X)$ имеется лишь конечное число (не больше $N(2R)$) неконгруэнтных ячеек Делоне. Поэтому если взять все возможные пары ячеек, смежных по общей гиперграни, то существует также конечное число таких пар.

При данном ρ для каждой точки $y \in C_x(\rho)$, $x, y \in X$, можно построить цепь из ячеек Делоне $D_1, \ldots, D_m$, в которой каждые две последовательные ячейки D_i и D_{i+1} смежны по гиперграни, $i = 1, \ldots, m-1$, а также x есть вершина ячейки D_1 и y — вершина в D_m. Более того, эта цепь может быть выбрана так, что все вершины каждой ячейки D_i отстоят от точки x не далее чем на $\rho + 2R$, т. е. все эти вершины принадлежат $C_x(\rho + 2R)$. Длина m цепи в разбиении Делоне $\mathrm{Del}(X)$, связывающей x с $y \in X$, для любого множества Делоне X ограничена сверху некоторой константой M, которая зависит от параметров r, R множества X и радиуса ρ, но не зависит от выбора множества X.

Напомним, что для X предположительно имеется конечное число $N(2R)$ $2R$-кластеров. Возьмём теперь какой-нибудь класс из $N(2R)$ классов, и пусть $C_x(2R)$ — $2R$-кластер. Выделим из X подмножество $C_x(2R)$ и рассмотрим произвольное множество Делоне X', которое удовлетворяет двум условиям:

а) $X' \cap B_x(2R) = C_x(2R)$;

б) каждый $2R$-кластер в X' эквивалентен некоторому $2R$-кластеру множества X.

Сейчас мы увидим, что для произвольного значения ρ существует конечное число расширений кластера $C_x(2R)$ до множества, которое может быть ρ-кластером $C'_x(\rho)$ множества X'.

Заметим, что из-за условия б) каждый многогранник Делоне для X' конгруэнтен многограннику Делоне для X. Поэтому для X' верно следующее: для любой точки $x' \in X'$ с условием $|xx'| \leqslant \rho$ имеется цепь $D_1, D_2, \ldots, D_m$ многогранников, конгруэнтных ячейкам Делоне для X, таких что x' есть вершина многогранника D_m.

Напомним, что любая такая цепь начинается с ячейки $D_1 \in \mathrm{St}_x$. Для такой цепи выполняются три условия. Так как положение в пространстве $2R$-кластера $C_x(2R)$ задано, то цепь начинается с одного из конечного числа многогранников, положение которых в пространстве задано однозначно. Каждый многогранник цепи конгруэнтен некоторому многограннику из конечного набора попарно неконгруэнтных многогранников Делоне. Длина m цепи не превышает некоторого M. Количество таких цепей конечно. Давайте для данного M обозначим через V_M множество всех вершин многогранников, входящих во все цепи не длиннее M. Согласно вышесказанному множество V_M конечно для любого натурального M. С другой стороны, для $\rho > 0$ всякий возможный ρ-кластер $C'_x(\rho)$ в множестве Делоне X' есть подмножество множества V_M. Так как число всех подмножеств конечного множества конечно, то количество ρ-кластеров в X' для любого данного $\rho > 0$ тем более конечно. Таким образом, любое множество Делоне X' с данным конечным набором $2R$-кластеров — конечного типа. $\square$

Лемма 2.2. *Пусть $X \subset \mathbb{R}^d$ — множество Делоне, тогда ранг $2R$-кластера $C_x(2R)$, т. е. размерность аффинной оболочки $2R$-кластера, равен d.*

Доказательство. Возьмём точку $x \in X$, и пусть St_x — множество всех вершин ячеек Делоне, сходящихся в точке x. Так как каждая ячейка Делоне — это многогранник, вписанный в пустую сферу радиуса не более R, то $\mathrm{St}_x \subset B_x(2R)$. Следовательно, множество St_x есть подмножество кластера $C_x(2R)$. Ранг множества вершин ячейки Делоне равен d, а следовательно, ранг кластера $C_x(2R)$ также равен d. $\square$

По лемме 2.1 группа $S_x(2R)$ конечна. Для данной конечной группы G назовём *башней группы* G последовательность вложенных друг в друга подгрупп, начинающуюся с группы G и заканчивающуюся тривиальной группой, состоящей лишь из тождественного движения:

$$G := G_1 \supset G_2 \supset \cdots \supset G_m = E := \{e\},$$

число m назовём *высотой* башни.

Группа G, вообще говоря, имеет несколько башен. Обозначим через $m(G)$ высоту максимальной башни группы G.

Следующая оценка очевидна.

Предложение 2.1. $m(G) \leqslant \log_2 |G|$.

Из локального критерия правильности (теоремы 1.1) вытекает следующее утверждение.

Предложение 2.2. *Если для множества Делоне X имеем*
$$N\big((m(G)+1)2R\big)=1,$$
где $G:=S_x(2R)$, то X — правильная система.

Отсюда вытекает важное следствие.

Предложение 2.3. *Если $X\subset\mathbb{R}^d$ — локально асимметричное множество, т. е. если $S_x(2R)$ тривиальна для любого x, то из $N(4R)=1$ вытекает правильность X.*

Дальнейшее содержание относится к случаю $d=3$. Следующая лемма (см. [6]) позволяет ограничить порядок группы $S_x(2R)$ в случае $N(2R)=1$.

Лемма 2.3 (М. И. Штогрин). *Пусть $X\subset\mathbb{R}^3$ — множество Делоне и $N(2R)=1$. Тогда в группе $S_x(2R)$ порядок любой оси вращения не превышает 6.*

Доказательство. Рассмотрим точку $x\in X\subset\mathbb{R}^3$ и её $2R$-кластер $C_x(2R)$. Предположим, что группа $S_x(2R)$ кластера содержит поворот g вокруг оси l, порядок которого больше 6: $g\in\mathrm{Iso}(3)$, $g(l)=l$, $g^i\neq e$ для всех $i\leqslant 6$. Пусть x_1 — ближайшая к x точка из X, не лежащая на l, т. е. $x_1\notin l$ и $|xx_1|=\min\limits_{x'\in X\setminus l}|xx'|$. Это значит, что все точки $x''\in X$ с условием $|xx''|<|xx_1|$ лежат на оси l. Положим $\rho_0:=|xx_1|-\varepsilon$. Тогда для любого ε, $0<\varepsilon<|xx_1|$, ранг кластера $C_x(\rho_0)$ не превосходит 1.

Теперь заметим, что $|xx_1|\leqslant 2R$. Следовательно, точки x_1, $g(x_1)$, $g^2(x_1)$, $g^3(x_1)$ и т. д. принадлежат кластеру $C_x(2R)$ и образуют правильный n-угольник, $n>6$, вписанный в окружность радиуса, не превосходящего $|xx_1|$. Так как $n>6$, длина стороны n-угольника меньше $|xx_1|$. Так как три точки x_1, $g(x_1)$ и $g^{-1}x_1$ не коллинеарны и принадлежат кластеру $C_{x_1}(\rho_0-\varepsilon)$ для некоторого достаточно маленького $\varepsilon>0$, ранг кластера $C_{x_1}(\rho_0-\varepsilon)$, в отличие от ранга $(\rho_0-\varepsilon)$-кластера в точке x, не меньше 2. Это противоречие с допущением $N(2R)=1$ доказывает лемму 2.3. □

Ниже нам понадобится теорема о локально антиподальных множествах Делоне (см. [2], а также [3, 4, 7]).

Определение 2.1. Множество Делоне X называется *локально антиподальным*, если для любой точки $x\in X$ её $2R$-кластер центрально симметричен относительно своего центра x.

Теорема 2.1. *Локально антиподальное множество Делоне X с условием $N(2R)=1$ является правильной системой.*

Следующая простая лемма 2.4 будет неоднократно применена при доказательстве $10R$-теоремы данной работы. Ниже для данной точки $x\in X$ обозначим возрастающую последовательность всех расстояний от x до других точек множества X через $r_1, r_2, \ldots, r_k, \ldots$. В общем множестве Делоне X последовательности могут зависеть от выбора точки x. В случае $N(r_k) = 1$ отрезок $[r_1, r_k]$ последовательности один и тот же для любой точки $x \in X$.

Лемма 2.4. *В любом множестве Делоне $X \subset \mathbb{R}^3$ с условием $N(2R) = 1$ имеем $r_2 \leqslant 2R$.*

Доказательство. Так как очевидно, что $r_1 \leqslant 2R$, то нам остаётся доказать, что невозможно неравенство $2R < r_2$. Прежде всего заметим, что любая ячейка Делоне для множества X вписана в шар, радиус которого не превышает R. Поэтому для множества Делоне X из $N(2R) = 1$ вытекает, что для каждой ячейки Делоне её любая диагональ, включая ребро, имеет одну и ту же длину r_1. Отсюда следует, что каждая ячейка разбиения Делоне для X должна быть правильным симплексом. В случае трёхмерного евклидова пространства $\mathbb{R}^3$ правильный тетраэдр не разбивает пространство. Полученное противоречие доказывает лемму. □

2.2. Группа кластера и конечные группы

Группа $S_x(2R)$ симметрий $2R$-кластера $C_x(2R)$ — конечная подгруппа группы SO(3). Приведём список всех конечных групп (в обозначениях Шёнфлиса) в SO(3) и их порядки.

Список I (конечные группы в O(3))

Ia. Группа C_n порождена осью n-го порядка, $|\mathrm{C}_n| = n$.

Ib. Группа S_n порождена зеркальным поворотом (композиция поворота на угол $2\pi/n$ и отражения в перпендикулярной плоскости); если n нечётно, $|\mathrm{S}_n| = 2n$; если n чётно, $|\mathrm{S}_n| = n$ и $\sigma \in \mathrm{S}_n$.

IIa. Группа C_{nh} порождается осью n-го порядка и отражением в перпендикулярной («горизонтальной») плоскости π_h, $|\mathrm{C}_{nh}| = 2n$; если n чётно, то $\sigma \in \mathrm{C}_{nh}$.

IIb. Группа C_{nv}, порождается осью n-го порядка и отражением в плоскости π_v, проходящей через ось, $|\mathrm{C}_{nv}| = 2n$,.

IIIa. Группа D_n порождена двумя группами C_n и $\mathrm{C}_2' >$, где C_n — группа вращений, а C_2' — двойная ось в горизонтальной плоскости, $|\mathrm{D}_n| = 2n$;

IIIb. Группа D_{nh} порождена группой D_n и отражением в «горизонтальной» плоскости, $|\mathrm{D}_{nh}| = 4n$, если n чётное, то $\sigma \in \mathrm{D}_{nh}$.

IIIc. Группа D_{nd} порождена группой D_n и отражением в плоскости, проходящей через ось C_n и делящей угол между двойными осями пополам; $|\mathrm{D}_{nd}| = 4n$.

IVa. Группа T вращений тетраэдра, $|\mathrm{T}| = 12$,

IVb. Группа T_d симметрий тетраэдра $|\mathrm{T}_d| = 24$;

IVc. Группа T_h получается добавлением к T инверсии σ, $|\mathrm{T}_h| = 24$; $\sigma \in \mathrm{T}_h$.

Va. Группа O вращений куба, $|\mathrm{O}| = 24$.
Vb. Группа O_h симметрий куба, $|\mathrm{O}_h| = 48$, $\sigma \in \mathrm{O}$.
VIa. Группа I вращений икосаэдра, $|\mathrm{I}| = 60$.
VIb. Группа I_h симметрий икосаэдра, $|\mathrm{I}_h| = 120$, $\sigma \in \mathrm{I}_h$.

Выделим из них группы, которые не содержат осей вращения выше 6-го порядка, а среди них укажем те группы, которые содержат инверсию в центре.

Список II (группы, не содержащие осей выше 6-го порядка)

Ia. C_n, $|\mathrm{C}_n| = n$, $n = 2,3,4,5,6$.
Ib. S_n, $|\mathrm{S}_n| = 2n$, если n нечётно, т. е. $n = 3,5$; S_n, $|\mathrm{S}_n| = n$, если n чётно, $n = 2,4,6,8,10,12$, $\sigma \in \mathrm{S}_n$.
IIa. C_{nh}, $|\mathrm{C}_{nh}| = 2n$, $n = 2,3,4,5,6$; если n чётно, т. е. $n = 2,4,6$, то $\sigma \in \mathrm{C}_{nh}$.
IIb. C_{nv}, $|\mathrm{C}_{nv}| = 2n$, $n = 2,3,4,5,6$.
IIIa. D_n, $|\mathrm{D}_n| = 2n$, $n = 2,3,4,5,6$.
IIIb. D_{nh}, $|\mathrm{D}_{nh}| = 4n$, $n = 2,3,4,5,6$; если n чётное, то $\sigma \in \mathrm{D}_{nh}$.
IIIc. D_{nd}, $|\mathrm{D}_{nd}| = 4n$, $n = 2,3,4,5,6$.
IVa. T, $|\mathrm{T}| = 12$.
IVb. T_d, $|\mathrm{T}_d| = 24$.
IVc. T_h, $|\mathrm{T}_h| = 24$, $\sigma \in \mathrm{T}_h$.
Va. O, $|\mathrm{O}| = 24$.
Vb. O_h, $|\mathrm{O}_h| = 48$, $\sigma \in \mathrm{O}$.
VIa. I, $|\mathrm{I}| = 60$.
VIb. I_h, $|\mathrm{I}_h| = 120$, $\sigma \in \mathrm{I}_h$.

2.3. План доказательства $10R$-теоремы

Далее мы предполагаем, что для множества X выполняется $N(10R) = 1$, а следовательно, $N(\rho) = 1$ и для всех $\rho \leqslant 10R$.

1. Если для X группа $S_x(2R)$ $2R$-кластера тривиальна, то X — правильная система (см. предложения 2.1 и 2.2).
2. Пусть нетривиальная группа $S_x(2R)$ содержит инверсию σ. Тогда X — правильная система (по теореме 2.1). В действительности в этом случае достаточно требовать $N(2R) = 1$.
3. Пусть теперь нетривиальная группа $S_x(2R)$ не содержит инверсии и осей вращения более 6-го порядка. Все такие группы указаны в списке III.

Будет показано, что некоторые из этих групп не могут быть группой $S_x(2R)$ для множеств Делоне с условием $N(2R) = 1$. Один из аргументов при доказательстве подобной невозможности — это *аргумент контактного числа* (*КЧ-аргумент*).

Предложение 2.4 (КЧ-аргумент). *Пусть для точки $x \in X$ её r_1-оболочка $H_x(r_1)$ состоит из более чем 12 точек*: $|H_x(r_1| > 12$. *Тогда для X справедливо* $N(2R) > 1$.

Доказательство. Действительно, контактное число при $d = 3$ равно 12. Поэтому если $|H_x(r_1)| > 12$, то существуют $x_1, x_1' \in H_x(r_1)$, такие что $|x_1x_1'| < |xx_1| = r_1 < 2R$. Отсюда следует, что $2R$-кластеры $C_x(2R)$ и $C_{x_1}(2R)$ не эквивалентны, т. е. $N(2R) \geqslant 2$. □

Далее, если для X с $N(10R) = 1$ группа $S_x(2R) = G$ такая, что $m(G) \leqslant 4$, то по предложению 2.2 множество X — правильная система. Поэтому для доказательства $10R$-теоремы мы будем последовательно рассматривать в качестве $S_x(2R)$ лишь те группы G, которые не содержат инверсию σ для которых $m(G) \geqslant 5$. Для удобства выделим список III всех групп, которые не содержат инверсию, и дополнительно укажем параметр $m(G)$ для тех групп, для которых он превышает 4. Список III получается непосредственной проверкой каждой из групп из списка II.

Список III (группы, не содержащие инверсии σ и осей выше 6-го порядка)

Ia. C_2, C_3, C_4, C_5, C_6.
Ib. S_3, S_5.
IIa. C_{3h}, C_{5h}.
IIb. C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{5v}, C_{6v}.
IIIa. D_2, D_3, D_4, D_5, D_6.
IIIb. D_{3h}, D_{5h}.
IIIc. D_{2d}, D_{3d}, D_{4d}, D_{5d}, D_{6d}, $|\mathrm{D}_{6d}| = 24$, $m = 5$.
IVb. T_d, $|\mathrm{T}_d| = 24$, $m = 5$.
Va. O, $|\mathrm{O}| = 24$, $m = 5$.
VIa. I, $|\mathrm{I}| = 60$, $m = 5$.

Заметим, что в списке III нет групп с $m > 5$. В силу локального критерия (теорема 1.1)для доказательства $10R$-теоремы достаточно рассмотреть лишь те множества X с $N(10R) = 1$, для которых группа $S_x(2R)$ имеет $m = 5$.

Важно заметить следующее. Так как заранее мы не предполагаем, что множество X является правильной системой и что группа $2R$-кластера $C_x(2r)$ не есть подгруппа группы $\mathrm{Sym}(X)$, мы *не можем полагать*, что группа $S_x(2R)$ есть точечная кристаллографическая группа (один из 32 кристаллических классов).

Подчеркнём также, что в процессе доказательства теоремы мы не устанавливаем для каких групп $S_x(2R)$ с $m = 5$ существуют или нет правильные системы. Хотя этот вопрос представляет интерес, он не имеет прямого отношения к доказательству теоремы. Мы каждый раз доказываем, что конгруэнтность $10R$-кластеров (а зачастую кластеров меньшего размера) достаточна для того, чтобы множество (если оно существует) было правильной системой.

Рассмотрение групп с $m = 5$ удобнее начать с конца списка III.

2.4. Группа $S_x(2R) = \mathrm{I}$

Лемма 2.5. *Если в множестве Делоне $X \subset \mathbb{R}^3$ $N(2R) = 1$, то $S_x(2R)$ не содержит группу* I.

Доказательство. Предположим противное: $S_x(2R) \supset \mathrm{I}$, где I — это группа вращений правильного икосаэдра, $|\mathrm{I}| = 60$. Пусть x_1 — ближайшая к x точка, т. е. $|xx_1| = r_1 \leqslant |xx'|$ для всех $x' \in X$.

Стабилизатор $\mathrm{Stab}(x_1)$ точки x_1 в группе I может быть тривиальный или порядков 2, 3 или 5 (порядки осей в группе I). Соответственно количество точек в орбите $I \cdot x_1$ может быть 60, 30, 20 или 12. По КЧ-аргументу случаи 60, 30 и 20 точек невозможны.

Рассмотрим случай, когда x_1 лежит на оси 5-го порядка в группе I. Тогда орбита $\mathrm{I} \cdot x_1$ есть множество вершин икосаэдра с центром в x. Пусть x_1, x_2, x_3 — вершины произвольно выбранной грани икосаэдра.

Покажем, что тетраэдр $xx_1x_2x_3$ является симплексом Делоне в разбиении $\mathrm{Del}(X)$. Другими словами, покажем, что замкнутый шар B, описанный около тетраэдра $xx_1x_2x_3$, не содержит других точек из X: $X \cap B = \{x, x_1, x_2, x_3\}$.

Плоскость грани $\mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$ делит замкнутый шар B на две части: «шапка» B_1, расположенная по ту же сторону от $\mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$, что и точка x, и шапка B_2 — с противоположной от x стороны. Для определённости сечение шара с плоскостью входит в обе шапки. Легко заметить, что для всех $z \in B_1 \setminus \mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$ имеем $|xz| < |xx_1|$. Так как x_1 — ближайшая точка, то $z \notin X$, т. е. $B_1 \setminus \mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3) \cap X = \varnothing$.

Докажем теперь, что вторая шапка $B_2 \setminus \mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$ также не содержит точек из X. Прежде всего заметим, что центр шара B содержится внутри тетраэдра $xx_1x_2x_3$, а следовательно, и в шапке B_1. Таким образом, высота шапки B_1 больше высоты шапки B_2. По этой причине если мы отразим шапку B_1 в плоскости $\mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$, то зеркально симметричная шапка B_1' содержит в себе шапку B_2.

Вершина z шапки B_1', т. е. точка, зеркально симметричная точке x относительно плоскости $\mathrm{aff}(\triangle x_1x_2x_3)$, отстоит от точек x_1, x_2, x_3 на расстояние r_1. Очевидно, что для любой другой точки $z' \in B_1'$, $z' \neq z$, имеем $|z'x_i| < r_1$ хотя бы для одного $i \in \{1, 2, 3\}$. Поэтому $(B_1' \setminus \{z\}) \cap X = \{x_1, x_2, x_3\}$. А так как $B_2 \subset (B_1' \setminus \{z\}$, то $B_2 \setminus \{x_1, x_2, x_3\}$ также не содержит точек из X. Итак, мы доказали, что описанный около тетраэдра $xx_1x_2x_3$ замкнутый шар B не содержит других точек из X. Таким образом, тетраэдр является многогранником Делоне.

В точке x сходятся 20 тетраэдров Делоне, и все они подходят к x своими кратчайшими рёбрами. Но эти тетраэдры неправильные. К смежной вершине x_1 тетраэдр $xx_1x_2x_3$ подходит одним кратчайшим ребром x_1x и двумя более длинными рёбрами x_1x_2 и x_1x_3, $|x_1x| < |x_1x_2| = |x_1x_3| < 2R$. Таким образом, $C_x(2R)$ и $C_{x_1}(2R)$ не эквивалентны, т. е. $N(2R) > 1$. Полученное противоречие доказывает лемму 2.5. $\square$

2.5. Группа $S(2R) = \mathrm{O}$

Группа O — группа всех собственных вращений куба, $|\mathrm{O}| = 24$. Пусть x_1 — ближайшая к x точка из X, т. е. $|xx_1| = r_1$. Рассмотрим куб с центром в точке $x \in X$, группа которого есть группа $S_x(2R) = \mathrm{O}$. Будем впредь называть такой куб *координационным*. Центр куба K — точка x — это неподвижная точка группы O. Фундаментальную область группы O можно представлять как треугольник ABC на поверхности куба K, где вершины A и B лежат на тройных осях, а C — на оси четвёртого порядка группы O. Положим, что x — начало координат (u, v, w), и пусть куб K определяется неравенствами $|u| \leqslant 1$, $|v| \leqslant 1$, $|w| \leqslant 1$.

Так как $|S_x(2R)| = 24 > 12$, то по КЧ-аргументу стабилизатор точки x_1 в группе $S_x(2R)$ должен быть нетривиальным.

Более того, r_1-кластер $C_x(r_1)$ не может быть объединением двух орбит кратных точек, так как общее количество точек в этих орбитах не меньше 14, т. е. превышает 12, что невозможно по КЧ-аргументу.

Таким образом, для точки x_1 нужно рассмотреть следующие три возможности:

$x_1 = C$ (на оси четвёртого порядка группы O);
$x_1 = A$ (на тройной оси группы O, случай $x_1 = B$ эквивалентен этому);
$x_1 = D$ (на двойной оси группы O).

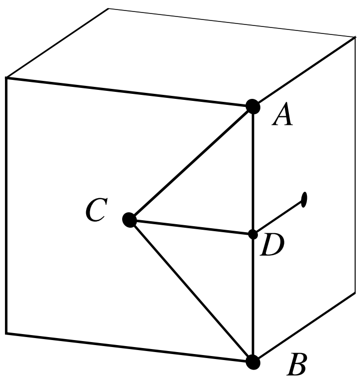

Рис. 2

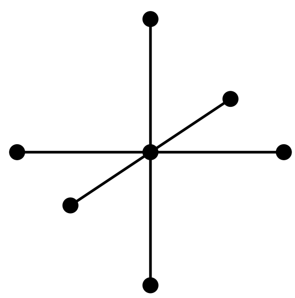

Рис. 3

Случай 2.5.1: $x_1 = C$.

Заметим, что при этом $r_1 = 1$ и кластер $C_x(r_1)$ состоит из семи точек, образующих «пространственный крест» (рис. 3). Рассмотрим кластер $C_{x_1}(r_1)$ с центром $x_1(1, 0, 0)$. Легко заметить, что этот кластер содержит на грани $u = 1$ куба K помимо своего центра x_1 ещё четыре точки x_i, x_i', x_i'' и x_i''', которые лежат на окружности, задаваемой уравнениями $u = 1$ и $v^2 + w^2 = 1$. Ясно, что расстояние $r_i = |xx_i| = r_1\sqrt{2}$ реализуется как i-е расстояние в X, где

$i \geqslant 2$, вообще говоря, так как пока мы не знаем, что r_i — это в точности второй минимум.

Лемма 2.6. *В случае* $x_1 = C$ *имеем* $r_2 = r_1\sqrt{2}$.

Доказательство. Прежде всего заметим, что по лемме 2.4 мы имеем $r_2 \leqslant 2R$.

Докажем, что $r_2 = r_1\sqrt{2}$, т. е. что расстояние $|xx_2| = r_1\sqrt{2}$, обозначенное ранее через r_i, в действительности второй минимум r_2.

Допустим противное: $r_2 < r_1\sqrt{2}$. Пусть $x_2 \in X$ — точка с условием $|xx_2| = r_2$. Так как $r_2 \leqslant 2R$ и $S_x(2R) = \mathrm{O}$, то среди точек орбиты $S_x(2R)\cdot x_2$ существует по крайней мере одна точка, расположенная в первом октанте: $u \geqslant 0$, $v \geqslant 0$, $w \geqslant 0$. Не умаляя общности, можно полагать, что x_2 находится в первом октанте. Мы также будем использовать для точек из r_1-оболочки $H_{r_1}(x)$ следующие обозначения: $x_1 = (1,0,0)$, $x_1' = (0,1,0)$, $x_1'' = (0,0,1)$. Так как $|x_2| = r_2 < r_1\sqrt{2}$, точка x_2 не может быть ближайшей к x_1 (иначе расстояние $|xx_2|$ было бы равно либо $r_1\sqrt{2}$, либо $2r_1$). Таким образом, $|x_1x_2| \neq r_1$, т. е. из $|x_1x_2| = r_j$, $j \geqslant 2$, следует $|x_1x_2| \geqslant |xx_2|$. Так как точка x_2 находится в первом октанте, то из неравенства $|x_1x_2| \geqslant |xx_2|$ следует, что x_2 находится в слое $0 \leqslant u \leqslant r_1/2$.

Те же рассуждения могут быть применены для точки x_2 относительно точек $x_1', x_1'' \in C_x(r_1)$. Получаем, что координаты v и w точки x удовлетворяют неравенствам $0 \leqslant v \leqslant r_1/2$ и $0 \leqslant w \leqslant r_1/2$. Мы получаем, что допущение $|xx_2| := r_2 < r_1\sqrt{2}$ приводит к тому, что точка x_2 находится в кубе

$$0 \leqslant u \leqslant \frac{r_1}{2}, \quad 0 \leqslant v \leqslant \frac{r_1}{2}, \quad 0 \leqslant w \leqslant \frac{r_1}{2}.$$

Отсюда следует, что $r_2 = |xx_1| \leqslant r_1\sqrt{3}/2 < r_1$. Из полученного противоречия вытекает, что $r_2 = r_1\sqrt{2}$. □

Напомним, что $S_x(2R) = \mathrm{O}$, и рассмотрим орбиту $\mathrm{O}\cdot x_2$. Не умаляя общности, можно считать, что $x_2 \in \operatorname{arc} DE$ (рис. 4) на окружности $u = 1$, $v^2 + w^2 = 1$. Положение точки x_2 на этой дуге определяется углом $\alpha := \angle x_2x_1D$, где $0 \leqslant \alpha \leqslant \pi/4$.

Подслучай $\boldsymbol{\alpha = 0}$, т. е. $x_2 = D$ (рис. 5).

Очевидно, что в этом подслучае положение кластера $C_{x_1}(r_1)$ с центром $x_1(1,0,0)$ фиксировано, причём кластер $C_{x_1}(r_1)$ расположен параллельно кластеру $C_x(r_1)$. Более того, положение двух кластеров $C_x(r_1)$ и $C_{x_1}(r_1)$ однозначно определяет положение r_1-кластера $Cx_2(r_1)$, где $x_2(1,1,0)$. Действительно, в кластере $C_{x_2}(r_1)$, помимо центра x_2, имеются ещё две точки, $x_1(1,0,0)$ и $x_1'(0,1,0)$, которые принадлежат также кластеру $C_x(r_1)$. Эти три точки x_2, x_1 и x_1' фиксированы и однозначно определяют положение кластера $C_{x_2}(r_1)$. Этот кластер расположен параллельно кластерам $C_{x_1}(r_1)$ и $C_x(r_1)$. Отсюда легко следует, что этот, а также r_1-кластер $C_{x'}(r_1)$ для любой другой точки $x' \in X$ сидит в узлах кубической решётки $\mathbb{Z}^3$, натянутой на векторы $(1,0,0)$, $(0,1,0)$ и $(0,0,1)$, т. е. множество $X = \mathbb{Z}^3$ — правильная система.

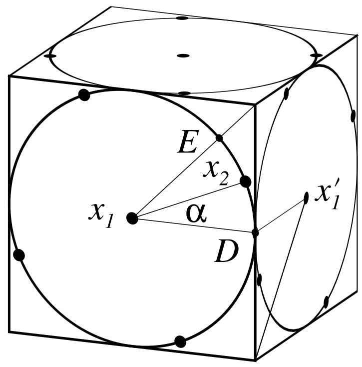

Рис. 4

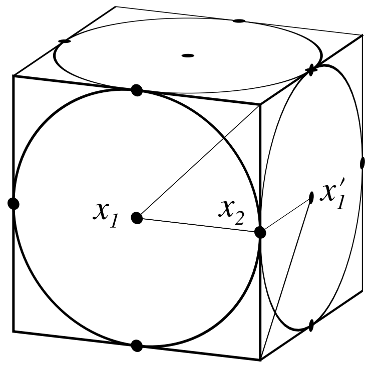

Рис. 5

Подслучай $0 < \alpha \leqslant \pi/6$.

Тогда на грани $v = 1$ куба найдётся точка $\hat{x}_2 \in \mathrm{O} \cdot x_2 \subset \bar{C}_x(r_2) \subset C_x(2R)$ (рис. 6), такая что $\angle \hat{x}_1 D \hat{x}_2 = \alpha$. Точка $\hat{x}_2$ получается из x_2 поворотом вокруг двойной оси xD группы O. Так как $\alpha < \pi/6$, то $|x_2\hat{x}_2| < |x_2 D| + |D\hat{x}_2| < r_1$, где r_1 — первый минимум в X и радиус окружностей, на которых находятся точки x_2 и $\hat{x}_2$. Однако последнее неравенство невозможно, так как r_1 — первый минимум и $N(2R) = 1$.

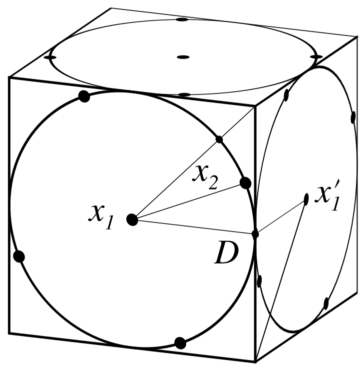

Рис. 6

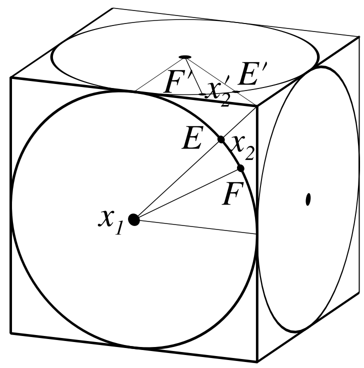

Рис. 7

Подслучай $\pi/6 < \alpha \leqslant \pi/4$.

Тогда на грани $w = 1$ куба на дуге $F'E'$ имеется точка $\breve{x}_2 \in \mathrm{O} \cdot x_2 \subset H_x(r_2)$ (рис. 7). Покажем, что для точки x_2 на дуге FE выполнено $|x_2 x_2'| < 1 = r_1$, что противоречит условию $N(r_1) = 1$ и выбору r_1. Для этого покажем, что расстояние $|x_2 y|$, где $x_2(1, v_2, w_3)$ — фиксированная точка на дуге FE, а точка y на дуге

$F'E'$, достигает максимума на одном из своих концов, F' или E'. Действительно, сфера с центром в точке x_2 радиуса ρ пересекается с плоскостью $w = 1$ по окружности $(u-1)^2+(v-v_2)^2 = (\rho-v_2)^2$. Легко проверить, что при увеличении радиуса ρ окружность поглотит дугу $F'E'$ при прохождении окружности через одну из граничных точек дуги, т. е.

$$\max_{y\in} |x_2y| \leqslant \max\{|x_2F'|, |x_2E'|\}.$$

Применяя те же рассуждения к центру, расположенному на дуге $F'E'$, получаем, что

$$\max\{|F'x_2|, |E'x_2|\} \leqslant \max\{|FF'|, |FE'|, |EF'|, |EE'|\} < r_1\sqrt{0{,}45} < r_1.$$

Противоречие доказывает, что подслучай $\pi/6 < \alpha \leqslant \pi/4$ невозможен.

Итак, в случае 2.5.1 ($x_1 = C$) только один подслучай ($\alpha = 0$) приводит к правильной системе (кубической решётке).

Случай 2.5.2: $x_1 = D$.

В этом случае r_1-оболочка $H_x(r_1)$ содержит 12 точек — середин рёбер куба $K = \{|u|, |v|, |w| \leqslant 1\}$ (рис. 8). Легко проверить, что решётка ранга 3, натянутая на векторы $e_1 = (2,0,0)$, $e_2 = (1,1,0)$, $e_3 = (1,0,1)$, — это хорошо известная гранецентрированная решётка FCC, дающая плотнейшую решетчатую упаковку пространства шарами. Подчеркнём, что решётка FCC — это множество Делоне X с $N(r_1) = 1$ и r_1-кластером $C_x(r_1)$. Сейчас мы покажем, что других (неконгруэнтных) множеств Делоне с $N(r_1) = 1$ и тем же кластером $C_x(r_1)$ нет.

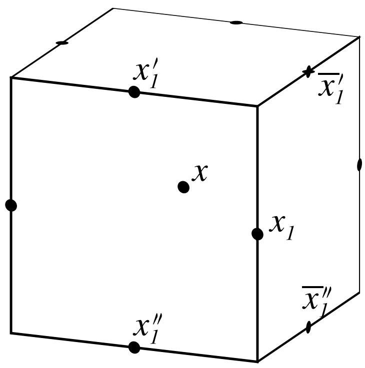

Рис. 8

Действительно, рассмотрим множество X с кластером $C_x(r_1)$ и точку $x_1 \in C_x(r_1)$. Тогда пересечение $C_{x_1}(r_1) \cap C_x(r_1)$ — это множество U, состоящее из шести точек: x, x_1, x_1', x_1'', $\bar{x}_1'$ и $\bar{x}_1''$ (см. рис. 8). Отметим, что кластеры $C_x(r_1)$ и $C_{x_1}(r_1)$ центрально симметричны относительно своих центров x и x_1.

Поэтому по данному пересечению U, которое, заметим, содержит оба центра x и x_1, однозначно определяются остальные точки обоих кластеров $C_x(r_1)$ и $C_{x_1}(r_1)$. Легко убедиться, что эти кластеры параллельны друг другу.

Введём вектор $t := x_1 - x$. Тогда $C_x(r_1) + t = C_{x_1}(r_1)$. Рассмотрим подмножество $X' \subseteq X$, состоящее из тех точек x', которые можно соединить с точкой x r_1-цепочкой, т. е. последовательностью $x := x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots,\ x' := x_n$ точек, в которой расстояния между любыми двумя последовательными точками x_i и x_{i+1} равны r_1. Тогда, так как все кластеры $C_{x'}(r_1)$ во множестве X' параллельны друг другу, имеем, что $X' + t_i = X'$, где $t_i = x_1^i - x$ для всех $x_1^i \in C_x(r_1) \setminus \{x\}$, $i = 1, 2, \ldots, 12$. Так как ранг кластера $C_x(r_1)$ (т. е. размерность аффинной оболочки кластера) равен 3, а сам кластер принадлежит гранецентрированной решётке FCC Λ, то подмножество X', а следовательно и всё множество X, содержит решётку Λ как подмножество, возможно несобственное.

Покажем, что множество X совпадает с Λ. Отметим, что в решётке Λ в каждой точке x сходятся в качестве многогранников Делоне для данной решётки лишь правильные октаэдры и тетраэдры с ребром r_1. Если решётка FCC была бы собственным подмножеством множества X, то «дополнительные» точки $y \in X \subset \Lambda$ должны лежать либо в таком тетраэдре, либо в октаэдре. Но в этом случае расстояние от точки x до ближайшей точки y меньше длины ребра, т. е. меньше r_1, что противоречит предположению о том, что во множестве X первый минимум равен r_1.

Случай 2.5.3: $x_1 = A$. Итак, r_1-кластер $C_x(r_1)$ состоит из девяти точек — центра куба и его восьми вершин. Назовём такой r_1-кластер *вершинно кубическим.*

Лемма 2.7. *Для X с $N(2R) = 1$ и вершинно кубическим r_1-кластером $C_x(r_1)$ имеем, что $r_2 = r_1 2/\sqrt{3}$.*

Доказательство. Прежде всего напомним, что по лемме 2.4 $r_2 \leqslant 2R$. Далее мы покажем, что $r_2 = r_1 2/\sqrt{3} = 2$. Для простоты мы будем пользоваться нормированными расстояниями в соответствии с тем, что координационный куб K имеет ребро длины 2. При этом допущении $r_1 = \sqrt{3}$. Расстояние $r_1\, 2/\sqrt{3} = 2$ в X присутствует, в частности, как расстояние между вершинами куба K. Чтобы показать, что $r_1\, 2/\sqrt{3} = 2$ — это второй минимум r_2 в X, рассмотрим грань куба K с уравнением $u = 1$ и на ней четыре вершины $x_1(1,1,1)$, $x_1'(1,-1,1)$, $x_1''(1,-1,-1)$, $x'''(1,1,-1)$. Опишем вокруг каждой из этих точек сферы радиуса $\sqrt{3}$. Так как $r_1 = \sqrt{3}$, то внутри каждой из них лишь центр является точкой множества X. Все четыре сферы пересекаются в двух точках: $x(0,0,0) \in X$ и $y(2,0,0)$.

Покажем, что $y \in X$. Точка y лежит в четырёхгранном конусе, натянутом на лучи xx_1, xx_1', xx_1'' и xx_1'''. Более того, в этом конусе точка y — ближайшая к x среди всех точек пространства, не лежащих внутри указанных четырёх сфер. Это рассуждение верно для каждого четырёхгранного конуса (из шести) с вершиной в $x(0,0,0) \in X$. Так как эти конусы разбивают $\mathbb{R}^3$, то $r_2 \geqslant |xy| = 2$.

Так как $2 \leqslant r_2 \leqslant 2R$, $N(2R) = 1$ и для точки x_1 имеются по меньшей мере три точки из X, отстоящие от x_1 на расстояние 2 (см. три ребра куба K, исходящие из вершины x_1), то это же расстояние реализуется и для точки x. Итак, $r_2 = 2 = r_1\, 2\sqrt{3}$. Лемма доказана. □

Из леммы 2.7 легко вывести теорему 2.2.

Теорема 2.2. *Пусть X — множество Делоне с $N(2R) = 1$, $S_x(2R) = \mathrm{O}$ и вершинно кубическим r_1-кластером $\{(x, \pm 1, \pm 1, \pm 1)\}$. Тогда X — правильная система. Более того, X — объёмно центрированная решётка*: $X = 2\mathbb{Z} \cup \big(2\mathbb{Z} + (1,1,1)\big)$.

Доказательство. Сначала заметим, что для x (как и для x_1) существуют по крайней мере три точки x_2, x_2', x_2'', отстоящие от x на расстояние $r_2 = 2 = r_1 2/\sqrt{3}$. Эти точки находятся на осях 4-го порядка группы $S_x(2R)$. Так как $r_2 \leqslant 2R$ и $S_x(2R) = \mathrm{O}$, то r_2-оболочка $H_x(r_2)$ состоит в точности из шести точек: $(\pm 2, 0, 0)$, $(0, \pm 2, 0)$, $(0, 0, \pm 2)$. Эти шесть точек вместе с центром x образуют «пространственный крест», который ориентирован параллельно осям координат (u, v, w). Легко проверить, что для точек $x' \in X$, $x'' := x' + (1,1,1)$ и $x''' := x' + (2,0,0)$ их r_2-кластеры $C_{x'}(r_2)$, $C_{x''}(r_2)$ и $C_{x'''}(r_2)$ не только конгруэнтны, но и параллельны друг другу. Отсюда следует, что X — решётка.

Для того чтобы увидеть, что X — объёмно центрированная решётка, выделим в X подмножество X' точек x', которые можно соединить с точкой x при помощи строгой r_2-цепочки $x = x^1, x^2, \ldots, x' = x^n$ (т. е. такой последовательности, в которой $|x^i x^{i+1}| = r_2 = 2$ для всех $i = 1, \ldots, n-1$). Так как каждый переход от x^i к x^{i+1} в r_2-цепочке происходит параллельно одной их трёх координатных осей, то множество X' — кубическая решётка $2\mathbb{Z}$ (множество всех точек с чётными координатами). Точка $x_1(1,1,1)$ является центром куба, натянутого на векторы $(2,0,0)$, $(0,2,0)$, $(0,0,2)$, порождающего решётку $2\mathbb{Z}^3$. Отсюда следует, что $X = 2\mathbb{Z} \cup \big(2\mathbb{Z} + (1,1,1)\big)$. □

Замечание. Легко убедиться, что в доказательстве можно обойтись более слабым требованием: вместо $S_x(2R) = \mathrm{O}$ можно было бы потребовать $S_x(2R) \subseteq \mathrm{T}$, где T — группа вращений правильного тетраэдра, $|\mathrm{T}| = 12$, $\mathrm{T} \subset \mathrm{O}$. Поэтому верна следующая более общая теорема.

Теорема 2.3. *Пусть X — множество Делоне с условием $N(2R) = 1$, $S_x(2R) \supseteq \mathrm{T}$ и вершинно кубическим r_1-кластером $\{x, (\pm 1, \pm 1, \pm 1)\}$. Тогда X — правильная система. Более того, X — объёмно центрированная решётка*: $X = 2\mathbb{Z} \cup \big(2\mathbb{Z} + (1,1,1)\big)$.

Так как случаи 2.5.1—2.5.3 исчерпывают все возможные варианты, следующая теорема подводит итоги раздела 2.5.

Теорема 2.4. *Пусть X — множество Делоне с $N(2R) = 1$ и $S_x(2R) \supseteq \mathrm{O}$. Тогда X — правильная система. Более того, X — это либо кубическая решётка, либо гранецентрированная решётка, либо объёмно центрированная решётка, а также $S_x(\rho) = \mathrm{O}_h$ для всех $\rho \geqslant r_1$.*

Отметим, что из теоремы 2.3 следует, в действительности, что правильных систем с $S_x(2R) = \mathrm{O}$ (а не O_h) не существует.

2.6. Группа $S_x(2R) = \mathrm{T}_d$

Полная группа тетраэдра T_d, $|\mathrm{T}_d| = 24$, — это последняя из интересующих нас групп из списка III. У остальных групп, напомним, высоты всех башен не превышают 4, и поэтому доказываемая $10R$-теорема для соответствующих множеств Делоне верна. Группа T_d — наиболее трудный случай.

Пусть, как и раньше, точка $x \in X$ — начало системы координат (u, v, w), K — координационный куб $|u| \leqslant 1$, $|v| \leqslant 1$, $|w| \leqslant 1$ и T — правильный тетраэдр, вписанный в K (рис. 9). Пусть $x_1 \in X$ — одна из ближайших к x точка: $|xx_1| = r_1$. Так как $S_x(r_1) \supseteq S_x(2R)$, то в фундаментальной области группы T_d содержится хотя бы одна точка, отстоящая от x на расстояние r_1. Итак, можно предполагать, что точка x_1 расположена в фундаментальной области группы T_d, заданной неравенствами

$$-w \leqslant v \leqslant u, \quad w \leqslant v.$$

Такую область можно представить на грани $u = 1$ куба K треугольником ABC (см. рис. 9). Можно считать, что точка $x_1 \in H_x(r_1)$ лежит на грани $u = 1$ куба K. Так как $|\mathrm{T}_d| = 24$, то в силу КЧ-аргумента стабилизатор точки x_1 нетривиален, т. е. точка x_1 расположена

1) либо на тройной оси группы T_d: $x_1 = A$, $|\mathrm{T}_d \cdot x_1| = 4$;
2) либо на двойной оси группы T_d: $x_1 = C$, $|\mathrm{T}_d \cdot x_1| = 6$;
3) либо на плоскости отражения $v = w$: $x_1 \in (AC)$, $x_1 \neq A, C$, $|\mathrm{T}_d \cdot x_1| = 12$;
4) либо на плоскости отражения $u = v$: $x_1 \in (AB)$, $x_1 \neq A, B$, $|\mathrm{T}_d \cdot x_1| = 12$.

Заметим, что не упомянутые в 1)—4) случаи $x_1 = B$ и $x_1 \in (BC)$ по соображениям симметрии эквивалентны случаям $x_1 = A$ и $x_1 \in (AC)$ соответственно.

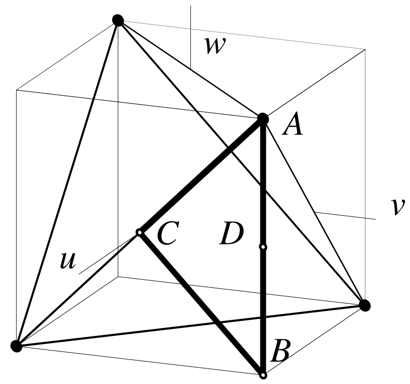

Рис. 9

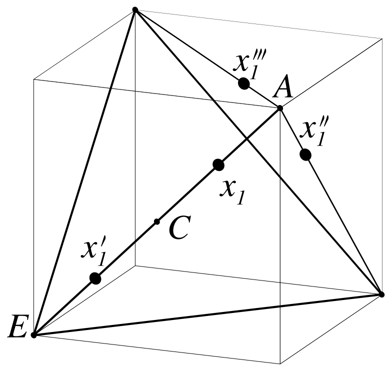

Рис. 10

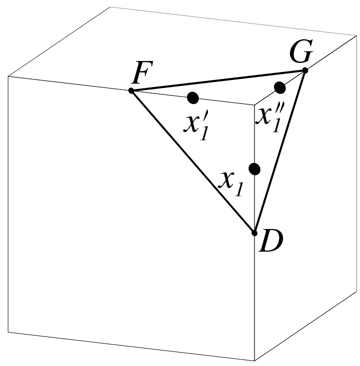

Рис. 11

Лемма 2.8. *Не существует множества Делоне с* $N(2R) = 1$ *и* $S_x(2R) = \mathrm{T}_d$, *если* $x_1 \in (AC)$ *или* $x_1 \in (AD)$, *где* $x_1 \in H_x(r_1)$, C — *середина ребра* AE *тетраэдра и* D — *середина ребра* AB *куба* (*рис.* 10 *и* 11).

Доказательство. 1. Пусть x_1 лежит в интервале (AC), $x_1 \neq A$, $x_1 \neq C$, и пусть точка $x_1' \in H_x(r_1)$ получается из x_1 поворотом вокруг двойной оси xC, а точки x_1'' и $x_1''' \in H_x(r_1)$ из x_1 поворотами вокруг тройной оси xA (рис. 10). Заметим, центр x куба на рис. 10 и 11 не показан.

Так как $|x_1x_1'| \geqslant r_1$, то $\angle x_1xx_1' \geqslant 60°$. Рассмотрим правильную треугольную пирамиду $xx_1x_1''x_1'''$ с вершиной x в центре координационного куба и с основанием $x_1x_1''x_1'''$. Так как боковое ребро пирамиды равно r_1, а ребро при основании $|x_1x_1''| \geqslant r_1$, то, как легко подсчитать, угол между боковым ребром и высотой в пирамиде не меньше 35,3°. Так как E — другая вершина куба (см. рис. 10), то $\angle Axx_1 = \angle Exx_1' \geqslant 35{,}3°$. Следовательно, $\angle AxE > 130°$, что противоречит тому, что $2\angle AxC = \angle AxE < 109{,}49°$. Противоречие доказывает, что по крайней мере одно из неравенств $|x_1x_1'| \geqslant r_1$ или $|x_1x_1''| \geqslant r_1$ неверно. Отсюда следует утверждение леммы для случая $x_1 \in (AC)$.

2. Пусть теперь $x_1 \in (AD)$ (рис. 11), при этом $x_1 \neq D, A$. Действительно, из равенств $|xD| = |DF| = |FG| = |GD|$ (где x — центр куба K, а D, F, G — середины его рёбер) следует, что $|xx_1| > |x_1x_1'|$. Таким образом, случай $x_1 \in (AD)$ невозможен в множестве X с $N(2R) = 1$. □

Случай 2.6.1: $x_1 = C$ (на двойной оси тетраэдра).

Так как в этом случае $|\mathrm{T}_d \cdot x_1| = 6$, то не исключено, что $H_x(r_1)$ может состоять из орбит нескольких точек. Легко заметить, что может быть дополнительно не более одной орбиты: орбиты точки, лежащей на тройной оси. Этот вариант двух орбит будет рассмотрен позже, в случае 2.6.3.

В случае одной орбиты $C_x(r_1)$ представляет собой «пространственный крест». В разделе 2.5 (случай 2.5.1) было показано, что множество X

с $N(2R) = 1$ и крестообразным r_1-кластером является правильной системой (кубическая решётка).

Случай 2.6.2: $x_1 = D$ (середина ребра куба K).

В этом случае возникает r_1-оболочка из 12 середин рёбер куба, и, как было показано (случай 2.5.2 в разделе 2.5), множество X с $N(2R) = 1$ и r_1-оболочкой, состоящей из 12 середин рёбер, есть правильная система (гранецентрированная кубическая решётка FCC).

Случай 2.6.3: $x_1 = A$ (на тройной оси).

Это наиболее трудоёмкий случай, и он занимает всю оставшуюся часть данной работы.

Сначала рассмотрим вариант случая 2.6.3, когда r_1-оболочка $H_x(r_1)$ состоит из нескольких T_d-орбит. Наличие нескольких орбит может быть связано с тем, что либо группа $S_x(r_1)$ богаче группы T_d, либо $S_x(r_1) = \mathrm{T}_d$, но существуют точки $y_1, \ldots, y_m \in H_x(r_1)$, такие что $H_x(r_1) = \bigsqcup\limits_i \mathrm{T}_d \cdot y_i$ и $\mathrm{T}_d \cdot y_i \cap T \cdot y_j = \varnothing$, $y_i \neq y_j$.

Лемма 2.9. *Пусть множество Делоне X удовлетворяет условиям $N(2R) = 1$ и $S_x(r_1) \supseteq \mathrm{T}_d$, точка x_1, где $|xx_1| = r_1$, лежит на тройной оси: $x_1 = A$. Положим, что $C_x(r_1)$ состоит по крайней мере из двух T_d-орбит. Тогда r_1-оболочка состоит в точности из двух орбит $\mathrm{T}_d \cdot x_1$ и $\mathrm{T}_d \cdot y$, где точка $y = B \in H_x(r_1)$* (рис. 12) *также лежит на тройной оси, и X — правильная система* (*объёмно центрированная решётка*).

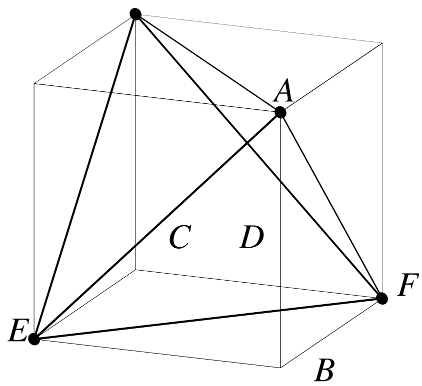

Рис. 12

Доказательство. Заметим, что если $y \in H_x(r_1)$ и $y \notin \mathrm{T}_d \cdot x_1$, то y находится на одной из осей группы T_d. В противном случае количество точек в орбите $\mathrm{T}_d \cdot y$ не меньше 12, а общее количество точек в r_1-оболочке $H_x(r_1)$ не меньше 16, что невозможно в силу КЧ-аргумента.

Итак, для y имеются две варианта. Первый вариант: y лежит на двойной оси xC тетраэдра (см. рис. 12). Легко оценить, что $\angle CxA < 55°$. При $x_1 = A$ вариант $y \in xC$ невозможен, потому что угол $\angle x_1xy$ для двух ближайших к x точек x_1 и y не меньше $60°$.

Второй вариант: y лежит на тройной оси. Можно считать, что $y = B$ (см. рис. 12).

Точка y порождает вторую T_d-орбиту в r_1-оболочке $H_x(r_1)$. Мы получаем кубический r_1-кластер, содержащий (помимо центра x) все восемь вершин куба. Применяя теорему 2.3, получаем, что в случае $x_1 = A$ и двух T_d-орбит в r_1-оболочке $H_x(r_1)$ множество X является правильной системой, более конкретно объёмно центрированной решёткой BCC. Лемма доказана. $\square$

Мы продолжаем исследовать случай $x_1 = A$. Теперь r_1-оболочка $H_x(r_1)$ состоит из *одной* T_d-орбиты из четырёх вершин тетраэдра. Соответствующий r_1-кластер назовём *тетраэдрическим*. Для определённости мы предполагаем, что тетраэдрический кластер вписан в координационный куб.

Вначале мы предъявим множество Делоне с $N(2R) = 1$ и тетраэдрическим кластером. Это будет бирешётка, которая, как известно, является правильной системой. Затем будет показано, что это множество — единственное множество Делоне с $N(2R) = 1$ и тетраэдрическим r_1-кластером.

Обозначим через Λ решётку, натянутую на базис $e_1(4,0,0)$, $e_2(2,2,0)$, $e_3(2,0,2)$. Легко проверить, что Λ есть гранецентрированная решётка с объёмом основного параллелепипеда 16. Рассмотрим бирешётку

$$\Lambda \cup \bigl(\Lambda + (1,1,1)\bigr). \tag{3}$$

Легко проверить, что в бирешётке (3) r_1-кластер тетраэдрический. Как всякая бирешётка, множество (3) — правильная система, так как на бирешётке транзитивно действует вторая триклинная группа $P\bar{1}$ (в обозначениях Шёнфлиса).

Теорема 2.5. *Пусть X — множество Делоне с $N(2R) = 1$ и тетраэдрическим r_1-кластером, вписанным в координационный куб. Тогда X — бирешётка* (3), *т. е. правильная система.*

Доказательство. Итак, мы рассматриваем $x_1 = A$ (рис. 13) По лемме 2.4 $r_2 \leqslant 2R$. Среди расстояний, встречающихся в X, есть расстояние $r^*{:=}2\sqrt{2/3}r_1$. В нормировке, представленной на рис. 13, $r_1 = \sqrt{3}$ и $r^* = 2\sqrt{2}$. Вообще говоря, мы пока не предполагаем и не знаем, что $r^* \leqslant 2R$, поэтому не имеем права воспользоваться условием $N(r^*) = 1$. Однако нетрудно убедиться, что в X с $N(r_1) = 1$ и тетраэдрическим r_1-кластером расстояние r^* реализуется для *любой* точки из X, в том числе и для x. Для x r^*-оболочка $H_x(r^*)$ непуста, т. е. существует точка $x' \in X$, такая что $|xx'| = r^*$.

Лемма 2.10. *Пусть X — множество Делоне с $N(2R) = 1$ и тетраэдрическим r_1-кластером. Тогда $r_2 = r^*$, где $r^* = r_1\,2\sqrt{2/3}$.*

Доказательство. Предположим, что $r_2 \neq r^*$. Тогда $r_2 < r^*$. Покажем, что неравенство $r_2 < r^*$ в X с условием $N(2R) = 1$ невозможно.

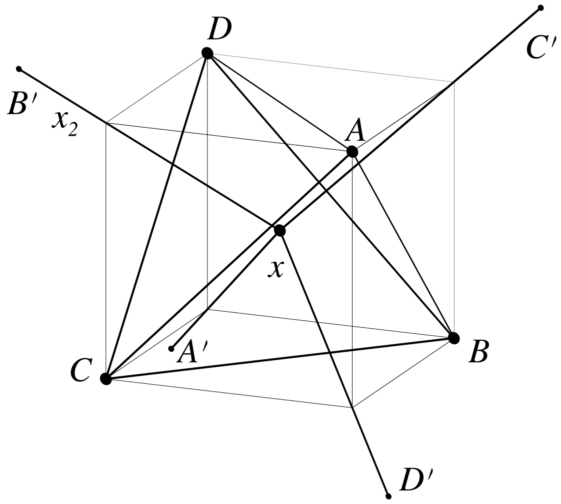

Рис. 13

Если $r_2 < r^*$, то вся оболочка $H_x(r_2)$ находится в тетраэдре, образованном срединными перпендикулярами к четырём отрезкам $|xx_1|, \ldots, |xx_1'''|$, $x_1, \ldots, x_1''' \in H_x(r_1)$. Действительно, для данного $x_1 \in H_x(r_1)$ и любого $x_2 \in H_x(r_2)$ имеем $|x_1x_2| \neq r_1$, так как из $|xx_1| = r_1 = |x_1x_2|$ следовало бы $r_2 = |xx_2| = r^*$. Таким образом, $|x_1x_2| \geqslant r_2$, откуда следует, что точка x_2 лежит в (замкнутом) полупространстве, образованном срединным перпендикуляром к отрезку xx_1 и содержащем точку x.

Таким образом, если в X $r_2 < r^*$, то любая точка $x_2 \in H_x(r_2)$ лежит в пересечении четырёх указанных полупространств — правильном тетраэдре T'. Напомним, что тетраэдр $T(ABCD)$ вписан в куб с вершинами $(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$. Тетраэдр T' имеет с T общий центр $x = O$ и гомотетичен ему с коэффициентом $-3/2$. Итак, тетраэдр T' имеет вершины $A'(-3/2, -3/2 - 3/2)$, $B'(3/2, -3/2, 3/2)$, $C'(-3/2, 3/2, 3/2)$, $D'(3/2, 3/2, -3/2)$.

Так как $r_2 \leqslant 2R$, то наряду с точкой x_2 r_2-кластер $C_x(r_2)$ содержит её T_d-орбиту. Для доказательства леммы 2.9 достаточно рассмотреть несколько подслучаев.

Подслучай x_2 на тройной оси.

Итак, мы предполагаем, что $r_2 < r^*$, и пусть точка x_2 — некоторая точка на тройной оси группы T_d. Так как $r_2 > r_1$, то x_2 находится вне координационного куба K. В силу $r_2 \leqslant r^*$ точка x_2 принадлежит тетраэдру $T' = A'B'C'D'$. Поэтому r_2 не превосходит расстояния от центра x тетраэдра T' до его вершины, равного $r_1\,3/2$, т. е. $r_2 \leqslant r_1\,3/2$. Орбита $\mathrm{T}_d \cdot x_2$ состоит из четырёх точек (на каждой тройной оси по точке).

В принципе, в таком множестве X (если оно существует) r_2-оболочка $H_x(r_2)$ не обязательно состоит из одной T_d-орбиты. Однако нетрудно показать, что любая точка y на сфере радиуса r_2 с центром в x, лежащая в фундаментальной области группы T_d — трёхгранном угле, задаваемом неравенствами

$$u - v \geqslant 0, \quad w - v \geqslant 0, \quad u + w \geqslant 0,$$

не будет удовлетворять хотя бы одному из неравенств $|x_2y| \geqslant r_1$, $|Ay| \geqslant r_1$, $|By| \geqslant r_1$, $|Cy| \geqslant r_1$, $A, B, C \in X$ (см. рис. 13).

Итак, предполагаем, что $r_2 < r^*$ и r_2-оболочка $H_x(r_2)$ состоит из одной орбиты $\mathrm{T}_d \cdot x_2$. Легко проверить, что шар $B_{(x+x_2)/2}(r_2/2)$ с центром в середине отрезка $[xx_2]$ и радиусом $r_2/2$ пуст внутри от точек из X и содержит на своей границе только две точки из X (точки x и x_2). На основании метода Делоне «пустого шара» отсюда следует, что отрезок $[xx_2]$ — ребро разбиения $\mathrm{Del}(X)$. Используя аргументы Делоне, получаем, что существует другой пустой шар B, содержащий на своей границе, помимо x и x_2, также вершины многогранника разбиения Делоне для множества X. Это означает, что на границе шара B есть хотя бы ещё одна точка, скажем y, из X (помимо x и x_2). Так как шар B пустой, то его радиус не больше $2R$. Соответственно, хорды $[xy]$ и $[x_1y]$ не длиннее $2R$. Значит, точка y принадлежит обоим $2R$-кластерам $C_x(2R)$ и $C_{x_1}(2R)$. Применяя к y группы $S_x(2R)$ и $S_{x_1}(2R)$, легко получить, что при условии $r_2 \leqslant r_1 3/2 < r^*$ в X существуют точки, отстоящие друг от друга меньше чем на r_1. Противоречие показывает, что этот подслучай невозможен.

Подслучай x_2 на двойной оси.

В тетраэдре T обозначим середину ребра AC через F (рис. 14). Длина $|xF|$ отрезка двойной оси xF равна 1. Поэтому длина соответствующего отрезка двойной оси в гомотетичном тетраэдре T' равна $3/2$. Напомним, что из-за предположения $r_2 < r^*$ точка x_2 принадлежит тетраэдру T' и в данном подслучае лежит на двойной оси тетраэдра T'. Поэтому $|xx_2| \leqslant 3/2\,|xF| = 3/2$. Последнее неравенство противоречит неравенству $|xx_2| = r_2 > r_1 = \sqrt{3}$. Противоречие показывает, что и этот подслучай невозможен.

Подслучай x_2 в плоскости отражения.

Пусть для определённости x_2 принадлежит плоскости $xB'D'$. Более того, достаточно взять точку x_2 внутри треугольника $B'xD'$ (другие варианты эквивалентны этому). Так как точка x_2 не лежит на двойной оси тетраэдра, то в некоторой плоскости γ, перпендикулярной диагонали xA и, следовательно, параллельной плоскости треугольника $B'C'D'$, лежат шесть точек из $S_x(2R) \cdot x_2$, которые образуют, вообще говоря, полуправильный шестиугольник H со сторонами a и b. Плоскость γ пересекает отрезки xB', xC' и xD' диагоналей куба в некоторых точках B'', C'' и D'' соответственно. Тогда полуправильный шестиугольник H вписан в правильный треугольник $B''C''D''$. Изображённый на рис. 13 треугольник $B'C'D'$ гомотетичен треугольнику $B''C''D''$ с коэффициентом, не меньшим 1. Поэтому для длины стороны треугольника $B''C''D''$ имеем $|B''D''| \leqslant |B'D'| = r^* 3/2$.

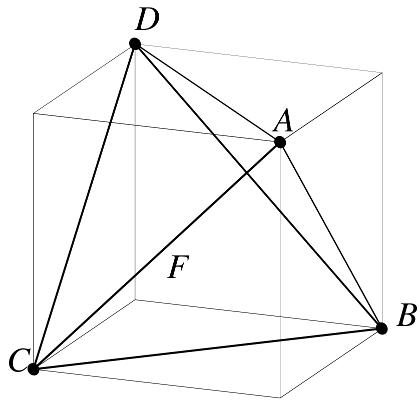

Рис. 14

Вернёмся к полуправильному шестиугольнику H, вписанному в треугольник $B''C''D''$. Если из двух его, вообще говоря разных, сторон a и b сторона a лежит на стороне $B''C''$ треугольника $B''C''D''$, то имеем $|a| + 2|b| = |B''C''| \leqslant \leqslant r^*\,3/2 = 3/2 \cdot 2\sqrt{2} = 3\sqrt{2}$. С другой стороны, $|a|, |b| \leqslant r_1$, $r_1 = \sqrt{3}$. Получаем противоречие $3\sqrt{3} \leqslant a+2b \leqslant 3\sqrt{2}$, которое доказывает что подслучай «x_2 лежит в плоскости отражения» невозможен. Лемма 2.9 доказана. $\square$

Итак, по лемме 2.9 $r_2 = r^*$. Так как $r_2 \leqslant 2R$, то $S_x(r_2) \supseteq \mathrm{T}_d$. Точка $x_1 = A$ (см. рис. 14) лежит на тройной оси $S_x(r_2)$, через которую проходят три зеркала (плоскости отражения) m_1, m_2, m_3 группы $S_x(r_2)$.

Заметим теперь, что прямая является тройной осью группы $S_x(r_2)$ тогда и только тогда, когда она проходит через x и любую точку, скажем x_1, из $H_x(r_1)$. Подобный аргумент верен для тройной оси группы $S_{x'}(r_2)$ любой точки $x' \in X$, в частности для x_1. Таким образом, прямая xx_1 является тройной осью как группы $S_x(r_2)$, так и группы $S_{x_1}(r_2)$. Через прямую xx_1 как тройную ось группы $S_{x_1}(r_2)$ проходят три зеркала M_1, M_2, M_3 этой же группы.

Покажем, что эти две тройки (m_1, m_2, m_3) и (M_1, M_2, M_3) зеркал совпадают. Пусть это не так. Тогда для точки $x_1' \in H_x(r_1)$, где $x_1' \neq x_1$, имеем $|x_1x_1'| = r_2$, т. е. $x_1' \in S_{x_1}(2R)$ и x_1' не лежит ни на одном из зеркал M_i группы $S_{x_1}(2R)$. Так как $x_1' \in C_{x_1}(r_2)$, то $C_{x_1}(r_2)$ содержит правильный или полуправильный шестиугольник H, образованный C_{3v}-орбитой точки x_1'. Легко вычислить, что этот шестиугольник вписан в окружность радиуса $\rho := r_2\sqrt{3}/3$.

Если все стороны шестиугольника H равны, то они равны r_1 и H правильный. Но это невозможно из-за $N(2R) = 1$, так как в точке x любые два отрезка xx_1 и xx_1', где $x_1, x_1' \in H_x(r_1)$, образуют угол, не равный $120°$, а в вершине шестиугольника H отрезки длины r_1 сходятся под углом $120°$.

Если стороны a и b не равны, то имеем

$$r_1 + r_2 = r_1\left(1 + 2\sqrt{\frac{2}{3}}\right) \geqslant |a| + |b| < 2\rho = 2r_2\frac{\sqrt{3}}{3} = r_1 4\frac{\sqrt{2}}{3}. \tag{4}$$

Так как $1+2\sqrt{2/3} > 4\sqrt{2}/3$, неравенство (4) неверно. Противоречие доказывает, что точка x_1' должна лежать также на некотором зеркале группы $S_{x_1}(r_2)$, проходящем через тройную ось xx_1. Отсюда следует, что тройка зеркал из группы C_{3v} с заданной осью определяется однозначно заданием одного из зеркал. Итак, зеркала группы $S_{x_1}(r_2)$, проходящие через тройную ось xx_1 совпадают с зеркалами из $S_x(r_2)$ и, следовательно, заданы уравнениями $u - v = 0$, $v - w = 0$, $u - w = 0$.

Помимо тройки m_1, m_2, m_3 в группе $S_x(r_2) = \mathrm{T}_d$ имеются ещё три зеркала m_1', m_2', m_3'. *Каждое* из этих зеркал, скажем зеркало m_1' (задаваемое уравнением $u + v = 0$), перпендикулярно одному из первой тройки, в данном случае зеркалу m_1 ($u - v = 0$), и составляет угол 60° с двумя другими зеркалами m_2 и m_3 из первой тройки. Так как, кроме этого, все зеркала группы $S_x(r_2)$ проходят через её неподвижную точку x, то задание в пространстве первой тройки зеркал из группы $S_x(r_2)$ определяет остальные зеркала, а следовательно, и всю группу $S_x(r_2)$ однозначно.

Рассмотрим подмножество $X' \subseteq X$ всех точек x', которые достижимы из x при помощи строгих r_1-цепочек вида $L := [x = y_0, y_1, y_2, \ldots, y_k = x']$, $y_i \in X' \subseteq X$, $|y_i y_{i+1}| = r_1$ для $i = 0, \ldots, k-1$. Другими словами, X' — r_1-компонента множества X, содержащая точку x.

Покажем, что $X' = X$. Действительно, по определению r_1-компоненты X' имеет тот же тетраэдрический r_1-кластер, что и X. Заметим, что точки r_1-оболочки $H_x(r_1)$ — это четыре (из восьми) вершины координационного куба K. Возьмём первую точку y_1 в строгой r_1-цепочке и её координационный куб K_{y_1}. Кубы K и K_{y_1} с центрами x и y_1 соответственно имеют общую полудиагональ xy_1. Как было показано выше, зеркала m_1, m_2, m_3 групп $S_x(r_1)$, проходящие через эту полудиагональ, и соответствующие зеркала группы $S_{y_1}(r_1)$ совпадают. А так как такая тройка зеркал и неподвижная точка y_1 группы $S_{y_1}(r_1)$ определяют всю группу однозначно, то вся шестёрка зеркал группы $S_{y_1}(r_1)$ параллельна шестёрке зеркал группы $S_x(r_1)$.

Отсюда следует, что имеющие общую полудиагональ xy_1 координационные кубы $K := K_x$ и K_{y_1} параллельны друг другу. Перемещаясь от x вдоль строгой r_1-цепочки и применяя на каждом шаге этот аргумент, получаем, что все координационные кубы $K_{x'}$, $x \in X'$, параллельны друг другу, а их центры и вершины принадлежат решётке $\mathbb{Z}^3$: $X' \subset \mathbb{Z}^3$.

Сейчас мы уточним структуру множества X'. Для четырёх вершин куба K, которые входят в кластер $C_x(r_1)$ (вершины вписанного тетраэдра), суммы их координат сравнимы по модулю 4. Вписать правильный тетраэдр в K можно двумя способами. Если в кластер входит вершина $(1, 1, 1)$, то $u + v + w \equiv 3 \pmod 4$. Если $(1, 1, 1)$ не входит, то входит вершина $(1, -1, 1)$, и мы имеем

$u+v+w \equiv 1 \pmod 4$. Впредь будем считать, что r_1-оболочка $H_x(r_1)$ содержит $x_1(1,1,1)$, и следовательно, все точки из $H_x(r_1)$ удовлетворяют соотношению $u+v+w \equiv 3 \pmod 4$.

Рассмотрим вершины координационного куба K_{x_1}: $(1,1,1,)+(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$. Так как точка $x(0,0,0)$ принадлежит оболочке $H_{x_1}(r_1)$, то все четыре точки из этой оболочки удовлетворяют сравнению $u+v+w \equiv 0 \pmod 4$. При этом другие четыре вершины координационного куба K_{x_1} этому сравнению не удовлетворяют.

Вернёмся к строгой r_1-цепочке $[x=y_0, y_1, \ldots, x'=y_k]$. Двигаясь от $x(0,0,0)$, мы получаем точки y_i из X', для которых

1) если i чётное, все координаты точки y_i чётны и удовлетворяют сравнению $u+v+w \equiv 0 \pmod 4$,
2) если i нечётное, то все координаты чётны и удовлетворяют сравнению $u+v+w \equiv 3 \pmod 4$.

Легко проверить, что условия (1) и (2) не только необходимы, но и достаточны для того, чтобы точка $y \in \mathbb{R}^3$ принадлежала X'.

Обозначим через $\Gamma \subset X'$ подмножество точек с условием (1). Так как для любого $\gamma \in \Gamma$ мы имеем $\Gamma + \gamma = \Gamma$, то $\Gamma \subset 2\mathbb{Z}^3$ — решётка. Более того, Γ — FCC-решётка, порождённая базисом $\{(4,0,0), (2,2,0), (2,0,2)\}$. Объём фундаментального параллелепипеда для Γ равен 16.

Так как точка y удовлетворяет условию (2) тогда и только тогда, когда $y-(1,1,1) \in \Gamma$, мы получаем, что

$$X' = \Gamma \cup \bigl(\Gamma + (1,1,1)\bigr). \tag{5}$$

Таким образом, множество X' есть бирешётка и, следовательно, правильная система.

Теперь мы покажем, что $X' = X$. С учётом строения FCC-решётки Γ и соотношения (5) получаем, что структура бирешётки X' такова, что максимальный «пустой шар» (т. е. шар, не содержащий точек из X' внутри) вписан в куб $2 \times 2 \times 2$ и имеет радиус $R = \sqrt{3} = r_1$.

Сейчас покажем, что $X' = X$. Согласно (5) устройство бирешётки X' таково, что максимальный «пустой» шар (т. е. не содержащий внутри точек из X') описан вокруг куба $2 \times 2 \times 2$ и имеет радиус $R = r_1 = \sqrt{3}$. Предположим, что $X' \neq X$, т. е. $X \setminus X' \neq \varnothing$, и пусть $y \in X \setminus X'$. Так как r_1 — расстояние между ближайшими точками в X, то для того чтобы отстоять от всех точек из X', точка y должна находиться в центре пустого шара, радиус которого r_1. Тогда y отстоит от ближайших точек из X' на расстояние r_1. Но это означает, что точка y входит в r_1-оболочку некоторой точки $x' \in X$. Значит, предположение $y \in X \subset X'$ влечёт $y \in X'$. Противоречие доказывает теорему 2.4. □

Так как теоремой 2.4 исчерпывается последний случай $S_x(2R) = \mathrm{T}_d$, доказательство основной теоремы данной работы — $10R$-теоремы — завершено.

В заключение скажем, что предложенный в работе подход, по-видимому, позволяет улучшить верхнюю оценку для радиуса правильности в трёхмерном пространстве до $8R$. Заметим, что эта оценка, как показывают примеры, не может быть меньше $6R$.

Автор благодарит Я. В. Кучериненко за помощь в изготовлении рисунков.

Литература

[1] Делоне Б. Н., Долбилин Н. П., Штогрин М. И., Галиулин Р. В. Локальный критерий правильности системы точек // ДАН СССР. — 1976. — Т. 227, № 1. — С. 19—21.

[2] Долбилин Н. П. Критерий кристалла и локально антиподальные множества Делоне // Вестник ЧелГУ. — 2015. — № 3 (358). — С. 6—17.

[3] Долбилин Н. П., Магазинов А. Н. Локально антиподальные множества Делоне // УМН. — 2015. — Т. 70, № 5 (425). — С. 179—180.

[4] Долбилин Н. П., Магазинов А. Н. Теорема единственности для локально антиподальных множеств Делоне // Тр. МИАН. — 2016. — Т. 294. — С. 230—236.

[5] Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 7. — М.: Эдиториал УРСС, 2004.

[6] Штогрин М. Об ограничении порядка оси паучка в локально правильной системе Делоне: Тезисы доклада. — Geometry, Topology, Algebra and Number Theory, Applications, The International Conference dedicated to the 120-th anniversary of Boris Nikolaevich Delone (1890—1980) (Moscow, August 16—20, 2010). Abstracts. — Moscow: Steklov Math. Inst., 2010. — P. 168—169.

[7] Dolbilin N. Delone sets with congruent clusters // Struct. Chem. — 2016. — Vol. 26, no. 6. — P. 1725—1732.

[8] Dolbilin N. Delone sets: local identity and global order // Discrete Geometry and Symmetry. Dedicated to Károly Bezdek and Egon Schulte on the Occasion of Their 60th Birthdays. — Berlin: Springer, 2017. — P. 109—125. — arXiv:1608.06842.