УДК 513.8.87

Д.В.Коваленко

ЗОННЫЕ СИСТЕМЫ ДЕЛОНЕ КАК МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЧТИ-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

The paper deals with the mathematical patterns of arrangement of atoms in solid matters — dot systems. A new approach is suggested to construct this kind of patterns: by applying an operation of differentiation of dot systems the author obtains a general mathematical criterion of identification of crystal and almost-crystal structures. Several theorems setting limits for the dot systems resulting in such structures are proved.

Введение

Точечные системы, обладающие теми или иными свойствами, вот уже более века привлекают к себе пристальное внимание ученых. В 1924 г. выдающийся российский геометр Б.Н.Делоне представил оригинальную конструкцию дискретных множеств, получившую впоследствии его имя, а также метод ее исследования [1]. Системы Делоне являют собой математическую модель расположения атомов в твердых веществах (которые заполняют все вещество и не подходят слишком близко друг к другу). В частности, кристаллическим структурам отвечают правильные системы Делоне [2], в которых каждая точка равно окружена всеми другими точками.

В 1984 г. был получен сплав с дальним (абсолютным) порядком, обладающим осями симметрии 5-го порядка, запрещенными в кристаллах [3]. Подобные соединения получили название *квазикристаллов*. В дальнейшем появились и другие физические структуры (фуллерены, кристаллы-двойники), не являющиеся кристаллическими, но, тем не менее, обладающие определенным порядком (симметрией). Такие соединения — будем в дальнейшем называть их *почти-кристаллическими* — вызвали наплыв математических моделей, пытающихся объяснить их существование. Однако, в отличие от кристаллов, исчерпывающее описание строения которых задают правильные системы Делоне, почти-кристаллические структуры пока не имеют своего единого описания.

Автором настоящей статьи найден оригинальный метод исследования точечных систем [4], открывающий путь к полному законченному описанию всех кристаллических и почти-кристаллических структур с комплексной единой моделью. Основная идея разработанного им подхода состоит в следующем: выяснить, какие условия следует наложить на общую систему Делоне, чтобы получилась точечная система, обладающая каким-либо порядком (симметрией).

Необходимые определения

Определение 1. Системой Делоне называется множество точек X, удовлетворяющее следующим двум аксиомам:

a) аксиома дискретности: расстояние между любыми двумя точками множества X не меньше длины r некоторого фиксированного отрезка;

b) аксиома покрытия: расстояние от любой точки пространства до ближайшей к ней точки множества X не больше длины R некоторого фиксированного отрезка.

Определение 2. Пусть X — произвольное множество точек в n-мерном евклидовом пространстве. *Векторной системой точки* $A\in X$ назовем множество V_A, состоящее из векторов, соединяющих точку A со всеми остальными точками системы X. *Производной* системы X назовем множество точек X', получающееся откладыванием от некоторой точки $A\in X$ всех векторов, соединяющих точки системы X. Очевидно, система X' центрально-симметрична относительно A.

Получение системы X' из X будем называть *дифференцированием*. Несмотря на то, что операцию дифференцирования можно применить к любым точечным системам, мы в дальнейшем ограничимся лишь системами Делоне.

Введем еще одно, ключевое, определение.

Определение 3. Будем называть систему Делоне X *зонной*, если ее производная X' снова является системой Делоне.

Примеры.

1. Если $X = T$ — целочисленная решетка, то $X' = X = T$ — также система Делоне, поэтому X — зонная.

2. Если X — мультирешетка, т.е. объединение конечного числа параллельно расположенных решеток $T_1,T_2,\ldots,T_k$, то, поскольку векторные системы точек A и B из одной решетки совпадают, X' есть объединение таких векторных систем для точек $A_1,A_2,\ldots,A_k$, где $A_i \in T_i$, поэтому аксиома дискретности сохраняется (с меньшим r), следовательно, X' — система Делоне и X — зонная.

Замечание. Вообще, поскольку $X \subset X'$, то при дифференцировании может нарушиться аксиома дискретности, но не аксиома покрытия.

Следствие. Всякое подмножество зонной системы Делоне, удовлетворяющее аксиоме покрытия, также обладает свойством зонности.

Это вытекает из того факта, что если $X \subset Y$, то и $X' \subset Y'$.

Приведем пример не зонной системы Делоне.

3. В качестве пространства возьмем прямую R^1 и занумеруем точки системы Делоне X целыми индексами (в силу аксиомы дискретности это можно сделать, поскольку их число счетно; в дальнейшем, рассматривая одномерные системы Делоне, будем применять такую же конструкцию). Определим X как

$$X_n = \begin{cases} n,\ n \le 0, \\ \\ 2k,\ n = 2k,\ k > 0, \\ 2k+1+\dfrac{1}{10^{2k+1}},\ n = 2k+1,\ k > 0. \end{cases}$$

Тогда спектр расстояний между точками системы X: $\mathrm{Sp}(X) = \{|x_i - x_j|\ x_i,x_j \in X\}$ не дискретен, и, тем более, X' — не система Делоне (есть точки накапливания, а именно $x = 1$), поэтому X — не зонная.

Если система X — зонная, имеет смысл построить вторую производную $X'' = (X')'$. В связи с этим важное конструктивное значение приобретает вопрос о зонности системы X'. Другими словами: может ли нарушиться аксиома дискретности при повторном дифференцировании, если она не была нарушена при взятии первой производной? Заметим, что определение зонной системы и пример 3 показывают, что при первом дифференцировании аксиома дискретности может быть нарушена.

Для ответа на поставленный вопрос обратимся вновь к наиболее наглядному — одномерному случаю.

Одномерные зонные системы и спектр расстояний между точками

Итак, пусть $X = \{x_n|\ n \in Z\}$ — последовательность точек на прямой, являющаяся зонной системой Делоне. Образуем множество $\mathrm{Sp}(X) = \{|x_i - x_j|\ x_i,x_j \in X\}$ — спектр расстояний множества X. Заметим, что в силу одномерности пространства $X' = \mathrm{Sp}(X) \cup \mathrm{Sp}_-(X)$, где $\mathrm{Sp}_-(X) = \{-|x_i - x_j|\ x_i,x_j \in X\} = -\mathrm{Sp}(X)$, а началом координат считается точка x_0. Поэтому в одномерном случае зонность системы X, т.е. выполнение аксиомы дискретности для ее производной X', сводится к дискретности спектра расстояний $\mathrm{Sp}(X)$, и в дальнейшем, говоря о производной X', будем в силу ее центрально-симметричности забывать о «левой» половине $\mathrm{Sp}_-(X)$ и отождествлять X' с $\mathrm{Sp}(X)$.

Перепишем Sp(X) в следующем виде:

$$\mathrm{Sp}(X)=\bigcup_{k=0}^{\infty}\Delta_k,$$

где $\Delta_k = \{|x_i - x_{i+k}|| \ i\in Z\}$ — множество расстояний между k-соседками, т.е. точками системы, между которыми разместилось ровно $k-1$ точек X. В частности, $\Delta_0=\{0\}$, $\Delta_1=\{|x_i - x_{i+1}||\ i\in Z\}$ — множество всевозможных расстояний между соседними точками системы X.

Оказывается, условие зонности системы X непосредственно связано с внутренней структурой введенных множеств Δ_k. Первым приближением к установлению этой связи служит следующая теорема.

Теорема 1. Пусть X — одномерная зонная система Делоне. Тогда каждое из множеств Δ_k конечно: $|\Delta_k| < \infty \ \forall k\in N$.

Доказательство. В силу того, что X — система Делоне, имеем $\Delta_1 \subset [r;2R]$, где r и R — константы из аксиом дискретности и покрытия. Поэтому необходимым условием зонности X будет конечность множества Δ_1: $|\Delta_1| = m < \infty$. Кроме того, имеем $|x_i - x_{i+k}| = |x_i - x_{i+1}| + |x_{i+1} - x_{i+2}| + \ldots + |x_{i+k-1} - x_{i+k}|$ — и коль скоро для каждого из слагаемых в правой части существует лишь конечное число вариантов, будет конечным и число возможных сумм. Теорема доказана.

Замечание 1. Если $|\Delta_1| = 1$, то $X = T$ — решетка.

Замечание 2. Условие конечности множества Δ_1 не является достаточным для зонности системы X. В самом деле, для системы

$$x_n = \begin{cases} n,\ n\ge 0,\\ n\alpha,\ n<0,\end{cases}$$

где $\alpha \in R_+\backslash Q$ — иррациональное положительное, имеем $|\Delta_1| = 2$, но $\mathrm{Sp}(X) = \{l + m\alpha|\ l, m \ge 0$ — целые$\}$ не обладает свойством дискретности. Известно, что всякое иррациональное число α можно приблизить рациональной дробью p/q с точностью до $1/q^2$, т.е. $\forall\alpha\in R_+\backslash Q$, $\forall q\in N\ \exists p\in N$: $|\alpha - p/q| < 1/q^2$, или $|q\alpha - p| < 1/q$, но $q\alpha, p\in \mathrm{Sp}(X)\ \forall p,q\in N$. Поэтому для любого $\varepsilon > 0$ найдутся две точки в Sp(X), отличающиеся друг от друга менее чем на ε, что нарушает аксиому дискретности для X', и стало быть, X — не зонная.

Согласно теореме 1, из зонности X необходимо следует, что Δ_1 состоит из конечного числа элементов: $\Delta_1 = \{r_1, r_2,\ldots,r_m\}$, где r_i — возможные расстояния между соседними точками. Если все r_i попарно соизмеримы, то, полагая $r_1 = 1$, получаем $r_i = a_i/b_i$, $a_i,b_i\in Z$, $i = 1,\ldots,m$. Поэтому $X \subset T$, где T — решетка с шагом $\dfrac{1}{\text{НОК}(b_2,\ldots,b_m)}$, и $X' \subset T' = T$; следовательно, X' — зонная.

Пусть теперь не все r_i из Δ_1 соизмеримы между собой. Рассмотрим подробно случай, когда $|\Delta_1| = 2$, т.е. $\Delta_1 = \{a, b\}$, где $a/b \notin Q$. Здесь исследовать структуру множеств Δ_k поможет геометрическая интерпретация.

Зонные системы с двумя несоизмеримыми расстояниями между соседними точками: геометрическая интерпретация

Заметим, что если какое-то из расстояний, например a, присутствует в системе X лишь конечное число раз k, то X есть подмножество мультирешетки, а именно $k + 1$ решеток с шагом b, каждая из которых проходит через левую вершину одного из отрезков длины a, а последняя — через правую вершину самого правого из таких отрезков (рис.1). Как уже отмечалось выше, в этом случае X' — также подмножество некоторой, вообще говоря, более мелкой, мультирешетки (с большим количеством решеток), следовательно, обладает свойством зонности. Поэтому следует остановиться на тех системах X, в которых оба возможных расстояния a и b между соседними точками встречаются бесконечное число раз.

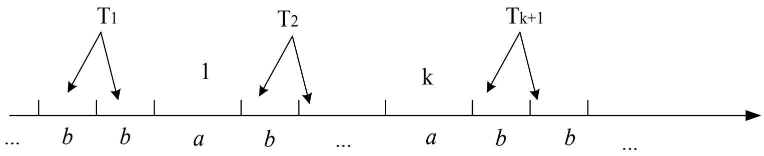

Рис.1

Изобразим систему Sp(X) (которая, напомним, отождествляется с производной X') на плоскости: каждой паре k-соседок (x_i,x_{i+k}) точек системы X, такой, что $|x_i - x_{i+k}| = ma + nb$, т.е. между точками x_i и x_{i+k} расположено m отрезков длины a и n отрезков длины b, поставим в соответствие точку плоскости с координатами (m,n).

Например, для системы X, описанной в замечании 2 предыдущего раздела (в этом случае $a = 1$ и $b = \alpha$), Sp(X) заполнит весь первый квадрант плоскости, поскольку $\forall m,n \geq 0$ $\exists x_i = x_m\ x_{i+k} = x_{-n} : |x_i - x_{i+k}| = ma + nb$.

Для правильной системы X:

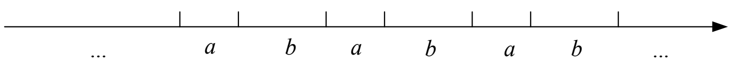

Рис.2

Sp(X) изобразится так:

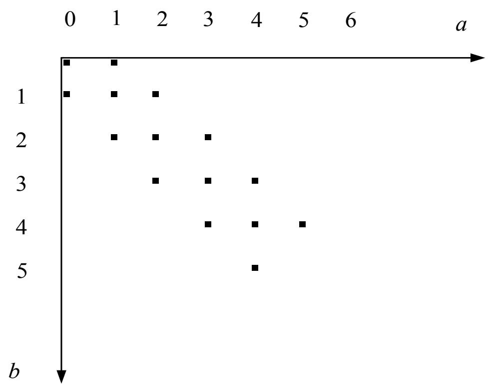

Рис.3

Действительно, для $k = 2n$ Δ_k состоит только из одного элемента $|x_i - x_{i+2n}| = n(a + b)$, а для $k = 2n + 1$ — из двух: $r_1 = n(a + b) + a$, $r_2 = n(a + b) +b$.

Заметим, что при таком изображении Sp(X) множество Δ_k изображается точками, лежащими на прямой $x + y = k$, т.е. состоит из таких точек (n_1,n_2), что $n_1 + n_2 = k$ и $\exists x_i,x_{i+k} \in X$: $|x_i - x_{i+k}| = n_1a + n_2b$.

Обозначим через A_k и a_k наибольшее и наименьшее количество отрезков a, а через B_k и b_k — наибольшее и наименьшее количество отрезков b, входящих в расстояния между k-соседками. Очевидно, $B_k = k - a_k$ и $A_k = k - b_k$, при этом необязательно $B_k = A_k$ или $b_k = a_k$.

Заметим, что все промежуточные значения между A_k и a_k достигаются (то же для B_k и b_k). Действительно (рис.4), двигаясь по прямой от пары точек (x_i,x_{i+k}), на которой достигается максимум по количеству a, т.е. A_k, к паре (x_j,x_{j+k}), на которой достигается минимум по количеству a, т.е. a_k, мы пробежим все промежуточные значения. Поэтому, изображая Sp(X)

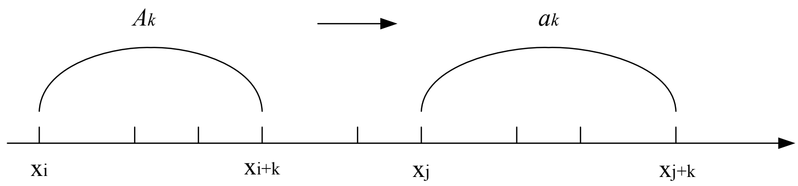

Рис.4

на плоскости, будем отмечать только крайние точки множества Δ_k, соединяя их с крайними точками множеств Δ_{k-1} и Δ_{k+1} и получая, таким образом, нечто вроде бесконечной изгибающейся трубы (рис.5). При этом ширина «трубы» на k-м участке (количество отрезков с целочисленными координатами, входящих в Δ_k) равна $A_k - a_k + 1$ (или $B_k - b_k + 1$). В дальнейшем Sp(X) и систему X' будем отождествлять с точками или отрезками Δ_k полученной «трубы».

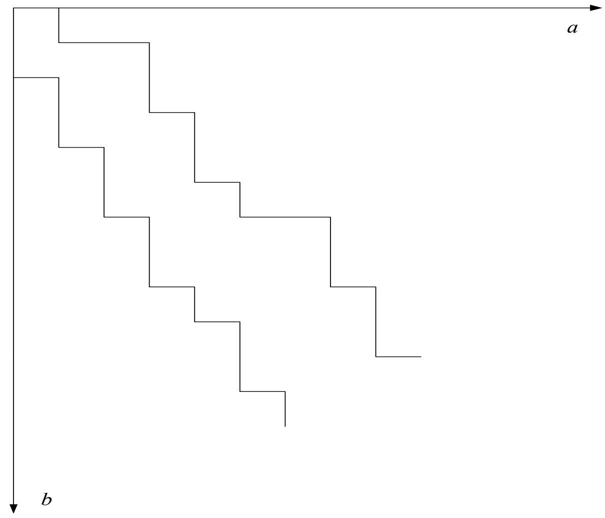

Рис.5

Геометрические свойства производной

Пусть для Δ_k известны A_k и a_k (или, что то же самое, B_k и b_k). Так как любое расстояние между (k + 1)-соседками образуется из расстояния между k-соседками добавлением либо a, либо b, то, очевидно, $A_{k+1} \geq A_k$, $a_{k+1} \leq a_k + 1$.

Из тех же соображений $A_{k-1} \geq A_\text{k} - 1$, $a_{k-1} \leq a_k$.

Получаем

Свойство 1. Если отрезок Δ_k принадлежит системе X', то ей во всяком случае принадлежат все целочисленные точки прямоугольника, имеющего Δ_k своей диагональю.

Далее, поскольку для любого элемента из Δ_{2n} выполнено равенство $|x_i - x_{i+2n}| = |x_i - x_{i+n}| + |x_{i+n} - x_{i+2n}|$, то $A_{2k} \leq 2A_k$, $a_{2k} \geq 2a_k$, и вообще для любого n: $A_{nk} \leq nA_k$, $a_{nk} \geq na_k$, отсюда имеет место

Свойство 2. Δ_{nk} не выходит за пределы «конуса», образованного лучами, исходящими из начала координат и проходящими через крайние точки Δ_k.

Замечание 1. Вся «труба», конечно, при этом не обязана содержаться в таком конусе (что видно, например, на рис.3, где «конус» для $k = 2$ состоит только из прямой $x = y$). Речь идет лишь об участках «трубы» с номерами, кратными k.

Замечание 2. Свойства 1 и 2 справедливы для любой одномерной системы Делоне X и ее производной X'.

Геометрия зонных систем

Выясним, какие ограничения накладывает на «трубу» условие зонности. Проведем на плоскости, изображающей X', прямую $ax + by = 0$. Заметим, что поскольку $a/b \notin Q$, то прямая не содержит других целочисленных точек плоскости, кроме (0,0), но проходит сколь угодно близко от них. Пусть теперь изображению системы $X' = \mathrm{Sp}(X)$ на «трубе» принадлежат точки $M(m_1,m_2)$ и $N(n_1,n_2)$. Это значит:

а) найдутся такие точки $x,y,z,t \in X$, что $|x - y| = m_1a + m_2b$, $|z - t| = n_1a + n_2b$;

б) системе X' принадлежат точки $m_1a + m_2b$ и $n_1a + n_2b$, причем расстояние между ними равно $(n_1 - m_1)a + (n_2 - m_2)b$. Таким образом, это расстояние будет тем ближе к 0 (что нарушает аксиому дискретности для X'), чем ближе к прямой $ax + by = 0$ располагается конец вектора $\boldsymbol{MN}$, отложенного от начала координат.

Теорема 2. Пусть X — зонная система Делоне с $\Delta_1 = \{a, b\}$, где $a/b \notin Q$. Тогда $\exists \sup\limits_k (A_k - a_k) = \sup\limits_k (B_k - b_k) = m < \infty$. Иными словами, Δ_k не может растягиваться по длине более чем на m, т.е. для расстояний между k-соседками возможно лишь не более чем m различных комбинаций из a и b.

Доказательство. Поскольку прямая $ax + by = 0$ проходит сколь угодно близко от точек с целочисленными координатами, можно для любого $\varepsilon > 0$ найти точку $L(l_1,l_2)$ с целыми координатами такую, что $0 < al_1 + bl_2 < \varepsilon$, т.е. лежащую сколь угодно близко к прямой $ax + by = 0$, и такую, что ее радиус-вектор имеет целые (разумеется, достаточно большие) и при этом разнознаковые координаты.

Предположим, что конечной точной верхней грани m, указанной в формулировке теоремы, не существует. Тогда найдется отрезок Δ_k сколь угодно большой ширины. Но по свойству 1 Δ_k входит в X' вместе со всем прямоугольником, для которого он является диагональю. Поскольку величина этого прямоугольника может быть выбрана сколь угодно большой, мы сможем найти в нем две точки $M(m_1,m_2)$ и $N(n_1,n_2)$ (рис.6), такие, что вектор $\boldsymbol{MN}$ имеет координаты (l_1,l_2), — как это было показано непосредственно перед формулировкой теоремы 1, две точки в X', расстояние между которыми меньше ε, что противоречит зонности X. Полученное противоречие доказывает теорему.

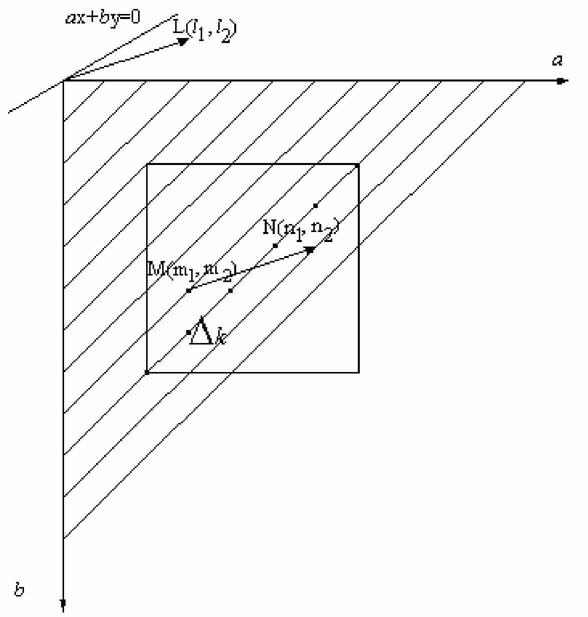

Рис.6

Замечание 1. Выше уже говорилось, что конечность множества Δ_1 (а в нашем случае $|\Delta_1| = 2$) влечет конечность Δ_k для любого номера k. Теорема 2 утверждает гораздо большее, а именно — наличие единой константы m, ограничивающей мощность всех множеств Δ_k.

Замечание 2. Геометрически теорема 2 означает, что для зонной системы X ее «труба» X' имеет конечную ширину m (рис.7).

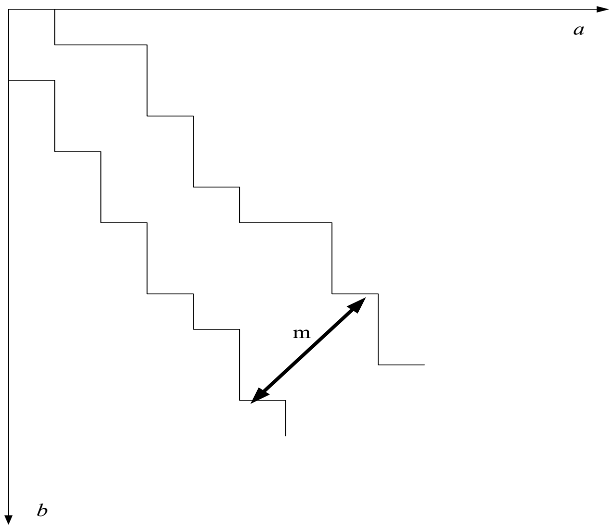

Рис.7

Дальнейшее развитие этих идей позволяет более полно выявить геометрические свойства зонных систем Делоне и получить ответ на сформулированный в конце второго раздела вопрос. Автор смеет утверждать, что именно зонность может служить критерием наличия в структуре вещества, отвечающего X, какого-либо порядка (симметрии). Таким образом, по меньшей мере для одномерных систем Делоне, зонные системы являются единой моделью кристаллических и почти-кристаллических структур.

1. Делоне Б., Падуров А., Александров А. Математические основы структурного анализа кристаллов. М.: Гостехтеориздат, 1934. 328 с.
2. Делоне Б.Н., Долбилин Н.П., Штогрин М.И., Галиулин Р.В. // ДАН СССР. 1976. Т. 227. № 1. С.19-21.
3. Гратиа Д. // УФН. 1988. Т. 156. № 2. С. 347-364.
4. Коваленко Д.В. // Изв. Междунар. академии наук высшей школы. 2003. № 4 (26). С.195-209.