

Самоподобие и самоинверсность квазикристаллов

© А.Е. Мадисон

Государственный университет морского и речного флота им. адмирала С.О. Макарова,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: alex_madison@mail.ru

(Поступила в Редакцию 21 мая 2013 г.)

В окончательной редакции 18 февраля 2014 г.)

Открытие квазикристаллов сыграло революционную роль в науке о конденсированном состоянии и вынудило отречься от догм классической кристаллографии, будто закономерное заполнение пространства одинаковыми блоками сводится исключительно к пространственным группам симметрии. Показано, что апериодические кристаллы наряду с подобием обладают свойством самоинверсности. В расширенном смысле самоинверсность подразумевает возможность композиции инверсии с трансляциями, поворотами и гомотетией, в то время как само по себе чистое отражение в круге может отсутствовать как самостоятельный элемент симметрии. Показано, что симметрия апериодических разбиений описывается группами Шоттки (специальным видом групп Клейна, порождаемых соответствующими дробно-линейными преобразованиями Мёбиуса); в теории апериодических кристаллов они играют ту же роль, что группы Федорова в теории кристаллических решеток. Приводится вывод правил локального соответствия для фрактального разбиения Пенроуза, обсуждается проблема выбора фундаментального домена группы движений квазикристалла, анализируется связь симметрии апериодических разбиений с симметрией конструктивных фракталов.

1. Введение

Со времен открытия дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, порядок и периодичность подразумевались синонимами. Основная парадигма современной кристаллографии долгое время базировалась на предположении, что структурное упорядочение тождественно по смыслу периодическому расположению атомов. Открытие квазикристаллов серьезно пошатнуло эту уверенность. Стало очевидным, что строгий дальний порядок, дискретность дифракционных картин, правильная внешняя огранка, анизотропия свойств, т.е. все те свойства, которые ассоциируются с понятием кристалла, вовсе не требуют обязательной периодичности.

Периодичность кристаллов многие годы была основной парадигмой не только для кристаллографии, но и для материаловедения, а также для химии и физики твердого тела. Все основные методы физики твердого тела в той или иной мере используют такие понятия, как волновая функция Блоха, ячейка Вигнера–Зейтца, зона Бриллюэна и т.п., т.е. базируются на предположении, что волновые функции электронов в кристаллах — это собственные функции операторов трансляции. Попытки применить стандартные методы физики твердого тела к апериодическим кристаллам вполне естественно наталкиваются на серьезные трудности: функции Блоха не являются базисными функциями для квазикристаллов. Были развиты новые методы и парадигмы для описания структуры и симметрии квазикристаллов и апериодических разбиений. Обзор современного состояния проблемы можно найти, например, в [1–5].

Согласно общепринятой точке зрения, в отличие от классических кристаллов, симметрия которых описывается пространственными группами Федорова, симметрия квазикристаллов описывается не группой, а лишь группой. На самоподобие квазикристаллов указывалось

многими авторами, но под этим всегда подразумевалось лишь повторение тех или иных частей общего структурного мотива в различных областях в уменьшенном масштабе. Автор предлагает рассматривать самоподобие апериодических разбиений в истинном теоретико-групповом смысле, т.е. как совпадение всего множества бесконечного числа узлов квазирешетки при применении композиции групповых операций подобия с различными особыми точками [6]. Далее показано, что в рамках такой концепции описание симметрии апериодических разбиений сводится к группам Шоттки; по убеждению автора в теории апериодических кристаллов они должны играть ту же роль, что и группы Федорова в теории кристаллических решеток. Также приводится вывод правил локального соответствия для фрактального разбиения Пенроуза, обсуждается проблема выбора фундаментального домена группы движений квазикристалла (аналога элементарной ячейки для периодического кристалла), анализируется связь симметрии апериодических разбиений с симметрией конструктивных фракталов.

2. Правила локального соответствия

Правила локального соответствия для разбиения Пенроуза на узкие и широкие ромбы впервые были рассмотрены де Брёйном [7]. Он предложил формально пометить стороны ромбов стрелками (одинарными и двойными). В разбиении Пенроуза два соседних ромба всегда соприкасаются только теми сторонами, которые маркированы одинаковым образом, при этом стрелки должны быть направлены в одну и ту же сторону. Существует восемь типов неэквивалентных вершин, различающихся локальным окружением. Существование правил локального соответствия означает, что специфика короткодействующих сил и ближний порядок для нескольких характерных локальных конфигураций предопределяют

квазикристаллический дальний порядок. Чтобы апериодический дальний порядок определялся однозначным образом, необходимо наложить дополнительные ограничения [8]. Имеет место следующая теорема. Любое разбиение плоскости на широкие и узкие ромбы будет разбиением Пенроуза, только если набор локальных конфигураций вершин ограничен так называемыми глобально допустимыми (они совпадают с перечисленными де Брёйном). Кроме того, никакие две соседние конфигурации, имеющие общий ромб, не могут быть связаны поворотом вокруг оси второго порядка, проходящей через центр общего ромба (более подробно см. [9], гл. 6). В работе [10], вероятно, впервые было предложено рассматривать фрактальное разбиение Пенроуза (kites-and-darts tiling). Было показано, что при превращении областей в форме воздушных змеев и дротиков во фрактальные в результате операций дефляции их границы обеспечивают естественные правила локального соответствия.

В работе [6] автором был рассмотрен идеализированный объект — бесконечно измельченное разбиение Пенроуза, заполняющее всю евклидову плоскость. В отличие от обычного разбиения на ромбы конечного размера бесконечно измельченное разбиение имеет фрактальную природу. Множество всех вершин обычного разбиения является подмножеством фрактального разбиения. Было показано, что симметрия такого фрактального разбиения может быть описана обычными методами теории групп, причем группу симметрии генерируют операции подобия с несовпадающими особыми точками. Детальное рассмотрение приводит к группам дробно-линейных преобразований комплексной плоскости (преобразований Мёбиуса) — дискретным подгруппам проективной специальной линейной группы $PSL(2, \mathbb{C})$. Суть предлагаемой концепции состоит в следующем: вся совокупность узлов фрактального разбиения Пенроуза представляет собой фрактальную пыль (канторово множество). При преобразованиях симметрии вся совокупность эквивалентных узлов определенного типа целиком совмещается сама с собой. При композиции операций подобия с различными особыми точками они преобразуются друг в друга.

Сгенерируем фрактальное разбиение Пенроуза. Для этого необходимо применить операции инфляции и дефляции к некоторой фигуре из широких и узких ромбов бесконечно число раз. На рис. 1, *a* и *b* представлен результат применения двух последовательных итераций операции дефляции к широкому и узкому ромбам соответственно. После первой итерации некоторые из уменьшенных копий широкого ромба принадлежат исходным областям лишь наполовину, так как ребра исходных ромбов проходят вдоль диагоналей уменьшенных копий. Обратим внимание читателей на то, что в качестве первой итерации дефляции мы используем уменьшение масштаба в τ^2 раз в отличие от общепринятого уменьшения масштаба в τ раз, поскольку только для четных степеней τ не происходит смены типов узлов. Расширим ис-

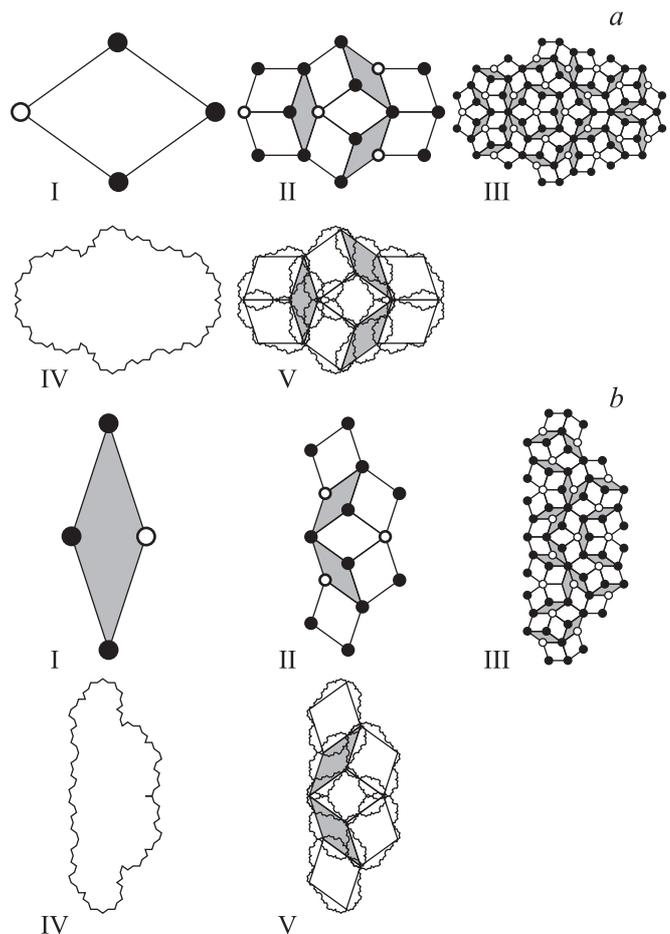


Рис. 1. Генерация фрактального разбиения Пенроуза: результат применения последовательных итераций операции дефляции к широкому (*a*) и узкому (*b*) ромбам. Фрактальное разбиение содержит неэквивалентные узлы только двух типов (показаны на рисунке светлыми и темными кружками). Ромбы заменяются на уширенные области с фрактальными границами так, чтобы для каждой последующей итерации более мелкие детали подразбиения содержались внутри границы целиком. Римскими цифрами обозначены: I — исходные ромбы, II — результат применения первой итерации дефляции к исходным областям, размеры ромбов уменьшаются в τ^2 раз, III — результат применения второй итерации дефляции, ромбы уменьшаются в τ^4 раз, IV, V — исходные ромбы заменяются фрактальными островами, дефляция фрактальных островов на их уменьшенные в τ^2 раз копии осуществляется по тому же принципу. Вместо разбиения на широкие и узкие ромбы по принципу „сторона к стороне“ получается покрытие взаимно перекрывающимися фрактальными островами. Области перекрытия являются точными уменьшенными копиями широкого фрактального острова.

ходные ромбы так, чтобы получившиеся области содержали все уменьшенные копии целиком. Применим вторую итерацию. Вновь получим, что некоторые из копий еще меньших размеров частично выйдут за пределы рассматриваемой области. Вновь расширим область так, чтобы включить в нее более мелкие ромбы, оказавшиеся

на границе. Продолжим эту процедуру до бесконечности. В результате вместо ромбов получатся уширенные области с фрактальными границами. Далее будем для них использовать термины „широкий фрактальный остров“ и „узкий фрактальный остров“ соответственно. В пределе границы областей будут изломаны бесконечно много раз. Описанная процедура превращения ромба в область с фрактальной границей принципиально не отличается от классических алгоритмов генерации конструктивных (геометрических) фракталов [11]. Например, генерация острова Коха из правильного треугольника автору представляется наиболее очевидной аналогией.

Заменим широкий и узкий ромбы на соответствующие острова с фрактальными границами и вновь применим первую итерацию дефляции. Внешняя форма фрактальных островов более не меняется (рис. 1). Разбиение на широкие и узкие ромбы по принципу „сторона к стороне“ преобразуется в покрытие исходных областей их собственными уменьшенными копиями. Области перекрытия являются точные уменьшенные копии широкого фрактального острова, и только они.

Наложим стандартное разбиение Пенроуза из плиток конечного размера поверх бесконечно измельченного (фрактального). Легко видеть, что для любой пары соседних ромбов стандартного разбиения их общее ребро пересекает бесконечно много уменьшенных копий исходного широкого фрактального острова, причем каждый раз общее ребро делит эти уменьшенные „островки“ в точности пополам. Порядок чередования уменьшенных копий фрактального острова вдоль границы любой пары ромбов однозначным образом определяет правила локального соответствия.

Согласно общепринятой точке зрения, существует восемь различных конфигураций вершин регулярного разбиения Пенроуза [2,7–9]. Эти конфигурации в совокупности с правилами локального соответствия определяют алгоритм разбиения всей евклидовой плоскости на широкие и узкие ромбы. В [6] было показано, что во фрактальном разбиении Пенроуза существуют всего лишь два типа неэквивалентных узлов. Узлами типа *A* назовем узлы с локальной симметрией центра разбиения *P3a*, узлами типа *B* назовем узлы с локальной симметрией центра разбиения *P3b* (см. обозначения, введенные в работе [6]). Для любого ромба (как широкого, так и узкого) одна из четырех вершин является вершиной типа *A*, а остальные три — вершиной типа *B* (рис. 1). Тогда существуют только два типа неэквивалентных ребер — $[AB]$ и $[BB]$.

Рассмотрим два соседних неэквивалентных ребра широкого ромба (рис. 2, *a*). После применения первой итерации дефляции ребро $[A_0B_1]$ будет разделено на две неравные части в соотношении $\tau : 1$ узлом B_2 , где τ — золотое сечение. При этом на границе двух соседних областей появится копия исходной области, уменьшенная в τ^2 раз. Аналогично ребро $[B_0B_1]$ будет разделено на части в соотношении $\tau : 1$ узлом A_1 , причем на соответствующей границе также появится

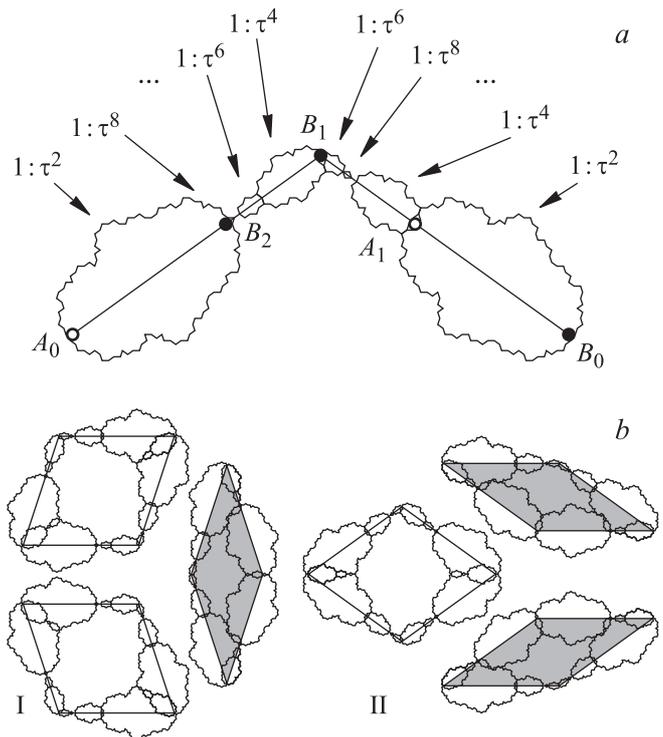


Рис. 2. Правила локального соответствия для фрактального разбиения Пенроуза: расположение уменьшенных копий исходной фрактальной области вдоль неэквивалентных ребер (*a*) и объединение исходных фрактальных областей в кластеры двух основных типов (*b*). I — кластер из одного узкого и двух широких ромбов, II — кластер из одного широкого и двух узких ромбов. Ребра делят уменьшенные копии исходной фрактальной области между двумя соседними ромбами в точности пополам. Правила локального соответствия определяются последовательностью расположения уменьшенных копий исходной фрактальной области вдоль ее собственной границы.

копия исходной области, уменьшенная в τ^2 раз. После второй итерации отрезок $[B_1B_2]$ будет разделен на две неравные части в соотношении $\tau : 1$ узлом типа *A*, а отрезок $[A_1B_1]$ — узлом типа *B*. При этом на границах соответствующих соседних областей появятся копии исходной области, уменьшенные в τ^4 раз. Продолжим процесс измельчения до бесконечности. Тогда отрезок $[B_2B_1]$ со всем своим локальным окружением будет являться точной уменьшенной копией отрезка $[B_1B_0]$ с его локальным окружением, а отрезок $[A_1B_1]$ будет являться точной уменьшенной копией отрезка $[A_0B_1]$.

Мы приходим к выводу, что в разбиении Пенроуза есть только два типа неэквивалентных ребер; следовательно, для них должны существовать только два правила локального соответствия. Но если мы сформулируем правило локального соответствия для ребер типа $[AB]$ в виде конкретного расположения уменьшенных копий широкого фрактального „острова“ на границе соседних ромбов, то получим тем самым и правило локального соответствия для ребер типа $[BB]$, поскольку второе

правило, если можно так выразиться, „содержится внутри“ первого правила. И наоборот, первое правило „содержится внутри“ второго. Эти правила соответствуют единому алгоритму генерации LS -последовательности Фибоначчи (см. [2], гл. 1).

Утверждение. Для двух типов ребер фрактального разбиения Пенроуза существует единственное правило локального соответствия, оно предопределяется двумя частями единого алгоритма генерации последовательности Фибоначчи.

В стандартном разбиении Пенроуза на плитки конечного размера можно выделить два основных типа кластеров. Это либо кластер из двух широких и одного узкого ромба, либо кластер из одного широкого и двух узких ромбов [6]. Заменяем ромбы соответствующими фрактальными островами. Широкие и узкие острова объединяются в аналогичные кластеры для бесконечно измельченного разбиения, причем локальное соответствие общих ребер широких и узких ромбов в стандартном разбиении Пенроуза определяется идентичностью расположения уменьшенных копий фрактальных островов вдоль их собственных границ в разбиении фрактальном

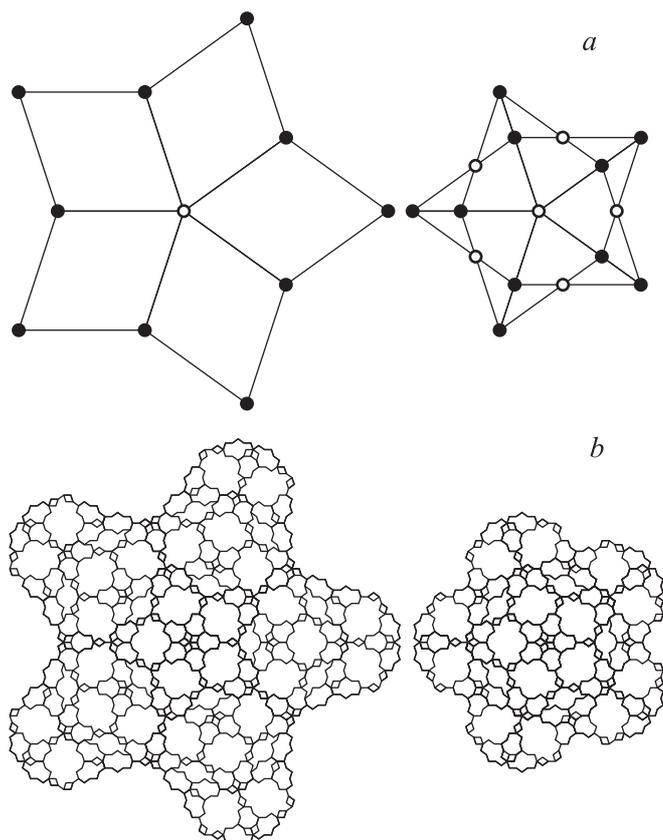


Рис. 3. Неоднозначность графического представления бесконечно измельченного разбиения Пенроуза в виде комбинации областей конечных размеров. Области, соответствующие звезде из пяти широких ромбов, составленной по принципу „сторона к стороне“ (*a*, слева), и звезде из взаимно перекрывающихся узких ромбов (*a*, справа), во фрактальном разбиении полностью совпадают при наложении друг на друга (*b*).

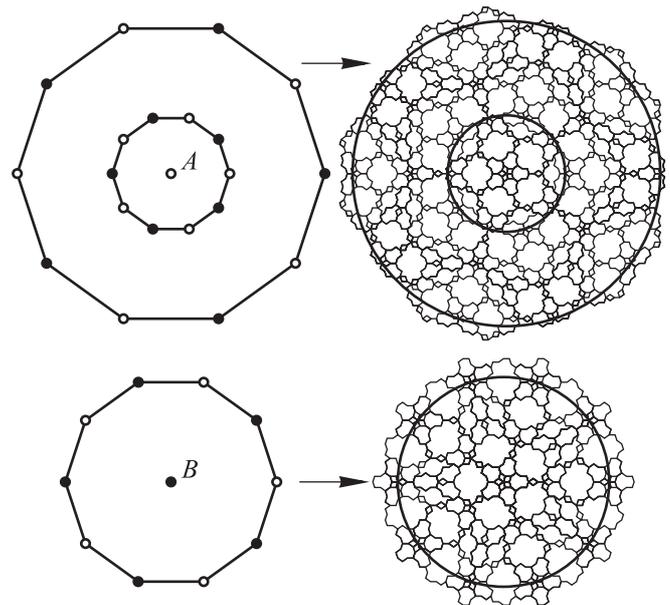


Рис. 4. Локальные окрестности узлов двух типов.

(рис. 2, *b*). Многократно изрезанные границы подходят друг к другу как ключ к замку и обеспечивают правила локального соответствия, названные естественными [10]. Они естественным образом удовлетворяют принципу композиции-декомпозиции [12]: две области, объединенные по правилам локального соответствия, содержат на границах свои уменьшенные копии, которые объединяются с соседними по тем же самым правилам.

Важное свойство фрактального разбиения Пенроуза — неоднозначность его графического представления в виде комбинаций областей конечных размеров (рис. 3). Составим звезду из пяти широких ромбов по принципу „сторона к стороне“ так, чтобы вершина типа *A* была в центре (рис. 3, *a*, слева). Составим также звезду из пяти взаимно перекрывающихся узких ромбов (рис. 3, *a*, справа). Заменяем широкие и узкие ромбы на соответствующие фрактальные острова, к которым один раз применена операция дефляции (рис. 3, *b*). Совместим теперь левую и правую части рис. 3, *b*. Видно, что при наложении друг на друга они полностью совпадают.

В разбиении Пенроуза на ромбы конечных размеров выберем произвольный узел типа *A*. Применим несколько раз операции инфляции/дефляции и заменим ромбы фрактальными областями. Это означает, что мы будем рассматривать локальную окрестность выбранного узла в увеличенном масштабе. Вокруг рассматриваемого узла всегда можно выбрать характерную локальную область, ограниченную декагоном с чередующимися вершинами типа *A* и типа *B*. Аналогичную процедуру можно применить для произвольного узла типа *B*. Сравнивая получившиеся фрактальные узоры, приходим к выводу, что любой узел квазирешетки имеет локальную окрестность одного из двух характерных типов (рис. 4).

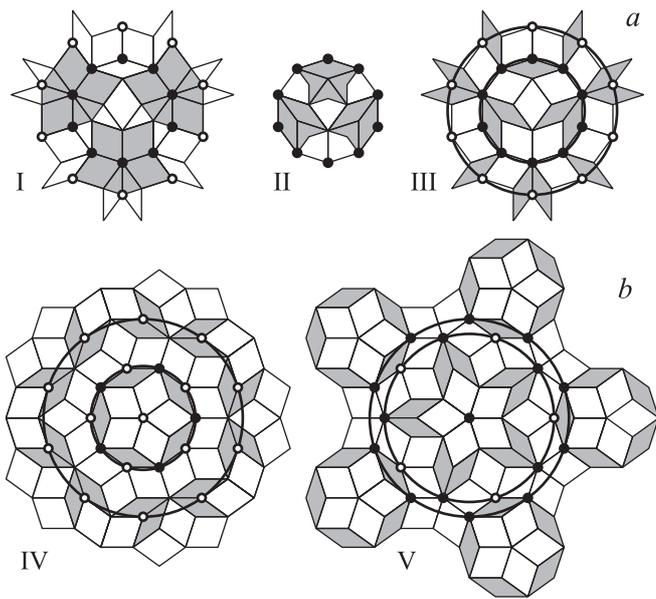


Рис. 5. *a)* Покрытие взаимно перекрывающимися эквивалентными кругами. В разбиении Пенроуза $P3$ существует два неэквивалентных типа декагонов Гуммельт, различающихся по размеру в τ раз. Большой декагон Гуммельт образован вершинами A -типа (I), малый декагон Гуммельт образован вершинами B -типа (II), причем малый содержится в центре большого. При переходе к фрактальному разбиению декагоны следует заменить окружностями (III). *b)* Разбиения $P3a$ (IV) и $P3b$ (V), в которых также существуют концентрические окружности различных типов. Они могут проходить через десять вершин A -типа, через десять вершин B -типа либо через множество по пять чередующихся вершин альтернативных типов.

Для фрактального разбиения характерно круговое свойство: его операции симметрии переводят окружность в соответственную окружность [6]. Поэтому естественно рассматривать локальную область любого узла в форме круга, т.е. при переходе от конечного разбиения к фрактальному декагоны следует заменить описанными вокруг них окружностями.

Попытки сгенерировать аperiodическое двумерное разбиение из одного-единственного протоэлемента предпринимались неоднократно [13]. Он мог бы рассматриваться как аналог элементарной ячейки [14]. Задача была решена с помощью покрытия декагонами Гуммельт вместо разбиения [15].

Было показано, что искомой областью является соответствующим образом раскрашенный правильный десятиугольник. Разбиение Пенроуза эквивалентно покрытию конгруэнтными декагонами. Существует только девять различных типов локальных конфигураций, определяемых правилами перекрытия декагонов Гуммельт.

Между разбиением Пенроуза на широкие и узкие ромбы и аperiodическим покрытием взаимно перекрывающимися декагонами имеет место взаимно однозначное соответствие [2]. Пользуясь локальными правилами,

в соответствии с которыми перекрываться могут только одинаково раскрашенные части соседних декагонов, можно построить покрытие всей плоскости. Согласно [2], существуют два полностью эквивалентных варианта выбора декагона Гуммельт в разбиении Пенроуза. Анализируя фрактальное разбиение, приходим к выводу, частично противоречащему общепринятой точке зрения: декагоны Гуммельт, различающиеся по размеру в τ раз, не являются полностью эквивалентными (рис. 5, *a*). Справедливо утверждение, что из малого десятиугольника можно сгенерировать целиком все аperiodическое покрытие, тождественное разбиению Пенроуза. Из десятиугольника в τ раз большего размера также можно сгенерировать то же самое разбиение в соответствии с теми же локальными правилами. Следует только изменить раскраску областей. Это утверждение также справедливо. Но сами эти декагоны не эквивалентны друг другу. Малый декагон образован вершинами типа B , а декагон в τ раз большего размера — вершинами типа A (рис. 5, *a*). Среди операций симметрии фрактального разбиения Пенроуза не существует элементов, которые переводили бы друг в друга окружности, описанные вокруг указанных двух типов декагонов (если ограничиться рассмотрением только операций подобия).

Если область, соответствующую тому или иному декагону, увеличить в τ^2 раз при помощи операции инфляции и разбить на ромбы первоначальных размеров при помощи дефляции, то получившаяся область не только с равным успехом может служить в качестве исходного протоэлемента, но и полностью ему эквивалентна во фрактальном разбиении. Предельный переход к бесконечно измельченному разбиению будет сопровождаться заменой декагонов на окружности. Покрытие плоскости декагонами превратится в покрытие взаимно перекрывающимися эквивалентными кругами (рис. 5, *a*, справа).

На рис. 5, *b* представлены разбиения Пенроуза $P3a$ (слева) и $P3b$ (справа). В разбиении $P3a$ можно выделить концентрические окружности, проходящие через узлы типа A , чередующиеся с окружностями, проходящими через узлы обоих типов. В разбиении $P3b$ можно выделить концентрические окружности, проходящие через узлы типа B , также чередующиеся с окружностями, проходящими через узлы обоих типов. Существует ли операция симметрии, переводящая окружность, описанную вокруг малого декагона Гуммельт, в соответствующую окружность в разбиении $P3b$ с центром в начале координат? Существует ли операция симметрии, переводящая окружность, описанную вокруг большого декагона Гуммельт, в соответствующую окружность в разбиении $P3a$ с центром в начале координат? Если такие операции существуют, то они представляют собой криволинейную симметрию, т.е. являются операциями из того же самого базисного набора непрерывной группы $PSL(2, \mathbb{C})$. Обратим внимание на то, что для двух концентрических окружностей в результате применения операции криволинейной симметрии их образы более не будут являться концентрическими.

Нам следует рассматривать операции, переводящие круг в круг. При рассмотрении аперiodических кристаллов неизбежно приходим к следующему вопросу [16]: „Как евклидову геометрию, в которой основную роль играют прямые и плоскости, можно расширить до круговой геометрии, в которой эта роль переходит к окружностям и сферам?“ Вероятно, первым, кто задался таким вопросом, был ученик Евклида Аполлоний Пергский. Ранее мы рассматривали композицию операций подобия (поворотной гомотетии) с различными особыми точками [6], но такая композиция сама по себе не обладает свойством полноты. Чтобы исправить этот недостаток, базисный набор групповых элементов обязательно следует пополнить операцией инверсии. С точностью до терминологии здесь можно говорить об инволюции Мёбиуса, отражении в круге, отражении в сферическом зеркале либо о криволинейной симметрии. В самом деле, инволюция Мёбиуса в композиции с комплексным сопряжением даст в результате отражение относительно окружности. Но комплексное сопряжение эквивалентно отражению относительно действительной оси, которую можно трактовать как окружность бесконечно большого диаметра.

Для самоподобных разбиений не следует исключать возможности существования таких операций „скрытой“ симметрии, которые отображают внутреннюю часть некоторого круга на внешнюю область вокруг другого круга, и наоборот (инверсия в круге). Для периодических кристаллов в рамках классической кристаллографии хорошо известны следующие утверждения: композиция двух отражений в параллельных зеркалах эквивалентна трансляции, композиция двух отражений во взаимно пересекающихся зеркалах эквивалентна повороту. Для аперiodических кристаллов можно сформулировать аналогичное утверждение: произведение инверсий с общим центром, но различными радиусами представляет собой гомотетию [16]. Иными словами, любая операция подобия может быть выражена в виде композиции двух инверсий. Зеркальное отражение — это частный случай инверсии в круге бесконечно большого диаметра.

Здесь мы должны подробно остановиться на чрезвычайно важном обобщении. Обычно под самоинверсными объектами подразумеваются такие, которые совмещаются сами с собой при отражении в круге. Классический пример таких объектов — аполлониевы сети [11]. В случае аперiodических кристаллов это требование не является обязательным. Можно увидеть аналогию с несимморфными федоровскими группами, когда, например, несобственные трансляции входят в состав плоскости скольжения или винтовой оси, но сами по себе отсутствуют как самостоятельные элементы симметрии. Самоинверсность аперiodических кристаллов также следует рассматривать в расширенном смысле. Само по себе чистое отражение в круге может отсутствовать как самостоятельный элемент симметрии. Оно не приводит к совмещению разбиения Пенроуза с собой, но мы не можем исключать возможности существования

инверсии в композиции с трансляциями, поворотами и гомотетией.

3. Фундаментальная область группы движений

При рассмотрении структуры периодических кристаллов вводятся понятия элементарной ячейки и ячейки Вигнера—Зейтца. Действуя многократно элементами симметрии кристалла на элементарную ячейку (фундаментальную область, фундаментальный домен), можно получить заполнение всего пространства одинаковыми структурными единицами. Возникает вопрос: можно ли использовать аналогичную процедуру для бесконечно измельченного разбиения Пенроуза? Сразу же оговоримся, что полная аналогия невозможна. Для фрактального разбиения любая область конечных размеров будет содержать бесконечное множество узлов квазирешетки, а его группа симметрии является собственно разрывной. Можно выбрать компактную односвязную область конечных размеров и, воздействуя на нее некоторыми из операций симметрии, осуществить полное покрытие всего пространства копиями исходной области без зазоров и пересечений по принципу „сторона к стороне“ (рис. 6). Особо подчеркнем, что элементы симметрии могут растягивать, скручивать и всячески искажать форму и размеры первоначально выбранной области. Копии „элементарной ячейки“ не будут равными в привычном смысле евклидовых жестких движений.

В [6] указывалось, что ту роль, которую для периодических кристаллов играют трансляции, для аперiodических кристаллов (квазикристаллов) исполняют трансвекции. Обобщением понятия прямой является геодезическая. Аналогично тому как в периодическом кристалле осуществляется сдвиг элементарной ячейки вдоль прямых на расстояния, кратные элементарным трансляциям, в аперiodических кристаллах следует осуществлять трансвекции фундаментального домена вдоль геодезических в соответствии с равномерной параметризацией. Геодезическими для разбиения Пенроуза являются логарифмические спирали. В качестве аналога элементарной ячейки можно выбрать криволинейный четырехугольник, противоположные стороны которого попарно образованы отрезками логарифмических спиралей (рис. 6, *a, b*). Применив сдвиг вдоль геодезической, получим уменьшенную или увеличенную копию исходной области вплотную к первой. Повторяя эту процедуру бесконечно много раз, заполним всю плоскость целиком. Выбор базисных векторов для решеток периодических кристаллов не является однозначным. При выборе фундаментального домена аперiodических кристаллов также имеет место вариативность. В качестве аналога элементарной ячейки можно альтернативным способом выбрать область, ограниченную дугами двух концентрических окружностей и двумя лучами по бокам.

Семейства логарифмических спиралей в разбиениях $P3a$ и $P3b$ полностью эквивалентны. Также и области, выделенные на рис. 6, a, b темным цветом, попарно идентичны. Этот факт объясняется с помощью метода, основанного на повороте римановой сферы [17]. При отображении логарифмических спиралей на сферу Римана они преобразуются в локсодромы [6]. После поворота сферы Римана и стереографической проекции локсодром на комплексную плоскость они преобразуются в узор, изображенный на рис. 6, c . Все точки пересечения получившихся кривых ложатся в точности на два семейства взаимно ортогональных окружностей. Фундаментальные домены, ограниченные отрезками логарифмических спиралей (рис. 6, a, b), после поворота сферы Римана преобразуются в фигуру, напоминающую по форме ромб с криволинейными границами (рис. 6, c).

При альтернативном выборе фундаментального домена он преобразуется в криволинейный четырехугольник, попарно ограниченный дугами взаимно ортогональных окружностей. Поскольку для аперiodических разбиений выполняется круговое свойство, всегда существует возможность выбора фундаментального домена таким образом, чтобы он был ограничен только дугами окружностей.

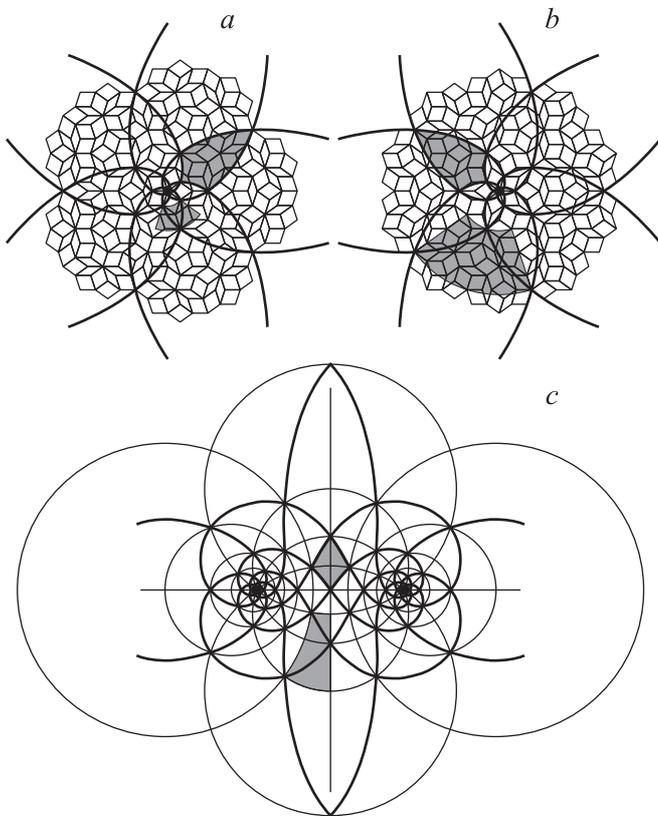


Рис. 6. Выбор фундаментального домена для разбиения Пенроуза. Два альтернативных способа выбора фундаментального домена в разбиении $P3a$ (a), $P3b$ (b) и в конформно преобразованном узоре, полученном методом поворота римановой сферы (c).

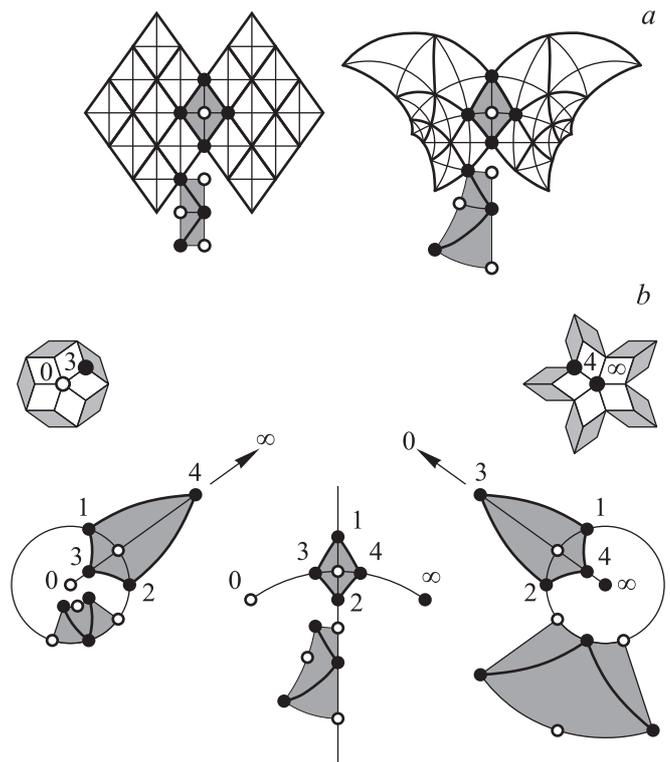


Рис. 7. a) Эквивалентность узлов при дробно-линейных преобразованиях. Аналогия между трансляциями элементарной ячейки периодического кристалла и трансвекциями фундаментального домена аперiodического кристалла. Генерация ромбической центрированной решетки путем последовательных целочисленных трансляций элементарной ячейки вдоль базисных векторов (слева) и генерация фрактального разбиения Пенроуза путем целочисленных сдвигов фундаментального домена в криволинейном пространстве вдоль геодезических (справа). b) Эволюция формы фундаментального домена при конформных преобразованиях, соответствующих последовательным поворотам римановой сферы.

Аналогию между трансляциями элементарной ячейки периодического кристалла и трансвекциями фундаментального домена аперiodического кристалла иллюстрирует рис. 7, a . В частности, в полном соответствии с методами классической кристаллографии ромбическую центрированную решетку можно получить путем последовательных трансляций элементарной ячейки в форме ромба вдоль базисных векторов (рис. 7, a , слева). Помимо этого ромбическую группу Браве можно также описывать как центрированную прямоугольную с точечной симметрией узлов $mm2$. Аналогичным образом можно представить себе генерацию фрактального разбиения Пенроуза из единственного криволинейного четырехугольника (рис. 7, a , справа). Соседние криволинейные четырехугольники следует принять равными друг другу. Они соответствуют целочисленным сдвигам фундаментального домена в криволинейном пространстве вдоль геодезических.

Ранее было показано, что разбиения евклидовой плоскости $P3a$ и $P3b$ (более корректно рассматривать разбиения комплексной плоскости, пополненной бесконечно удаленной точкой) соответствуют одному и тому же симметричному прообразу в виде фрактального множества точек на римановой сфере [6]. Если осуществить стереографическую проекцию такого „родительского“ прообраза из северного полюса римановой сферы на плоскость, касающуюся южного полюса, то получится разбиение $P3a$. Если осуществить стереографическую проекцию того же самого прообраза из южного полюса на плоскость, касающуюся северного полюса, то получится разбиение $P3b$. Следовательно, между узлами бесконечно измельченных разбиений $P3a$ и $P3b$ имеет место взаимно однозначное соответствие.

Если повернуть сферу Римана таким образом, чтобы полюса поменялись местами, то разбиения $P3a$ и $P3b$ также поменяются местами. Но при смене полюсов экватор останется на месте. Образ экватора в каждом из разбиений также останется на месте. Следовательно, бесконечно измельченные разбиения $P3a$ и $P3b$ преобразуются друг в друга посредством определенного конформного преобразования, так что некоторая окружность отображается на себя. При этом внутренняя часть круга в разбиении $P3a$ отобразится на внешнюю часть комплексной плоскости вокруг точно такого же круга в разбиении $P3b$, и наоборот. Центр круга меняется местами с бесконечно удаленной точкой.

Утверждение. Фрактальные разбиения Пенроуза $P3a$ и $P3b$ преобразуются друг в друга посредством инверсии в круге.

Установим поточечное соответствие между эквивалентными узлами квазирешеток во фрактальных разбиениях $P3a$ и $P3b$. Выберем в разбиении $P3a$ фундаментальные домены двумя альтернативными способами в соответствии с процедурой, описанной выше (рис. 6). Осуществим два последовательных поворота сферы Римана так, как описано в работе [6]. При первом повороте сферы Римана полюса переместятся на экватор. Геодезические разбиения $P3a$ (логарифмические спирали на рис. 6, *a*) преобразуются в характерный узор с двумя „водворотами“ (рис. 6, *c*). Параллели и меридианы сферы Римана отобразятся на систему взаимно ортогональных окружностей. При втором повороте сферы Римана полюса поменяются местами. Характерный узор с двумя „водворотами“ вновь преобразуется в систему взаимно пересекающихся логарифмических спиралей, но на этот раз они будут геодезическими разбиениями $P3b$ (рис. 6, *b*). Параллелям сферы Римана будут вновь соответствовать концентрические окружности, а меридианам — лучи, исходящие из центральной точки.

Эволюция формы фундаментального домена при конформных преобразованиях, соответствующих двум последовательным поворотам римановой сферы, представлена на рис. 7, *b*. Фундаментальный домен в форме криволинейного четырехугольника, образованного отрезками логарифмических спиралей из разбиения $P3a$,

претерпевает два конформных преобразования и превращается вновь в похожий четырехугольник из разбиения $P3b$. На первый взгляд он кажется подобным, но это не так. Соответственные вершины пронумерованы цифрами от 1 до 4. Вершины меняются местами. Экватору сферы Римана соответствуют эквивалентные окружности в разбиениях $P3a$ и $P3b$ (рис. 7, *b*, слева и справа), а также вертикальная прямая в узоре с „водворотами“ (рис. 7, *b*, в центре). В классическом разбиении Пенроуза на плитки конечного размера экватору сферы Римана соответствует декагон с чередующимися вершинами двух альтернативных типов.

Несколько обескураживающий на первый взгляд вывод получается, если попытаться сформулировать аналог граничных условий Борна–Кармана для аперiodических кристаллов. Для периодических кристаллов условия Борна–Кармана подразумевают отождествление противоположных граней макроскопического кристалла. В аперiodических кристаллах аналогичным образом следует отождествить внутреннюю и внешнюю окружности для достаточно широкого кольца (или внутреннюю и внешнюю поверхности пространства между двумя концентрическими сферами в трехмерном случае).

4. Группы Шоттки

Выше было показано, что фрактальные разбиения $P3a$ и $P3b$ преобразуются друг в друга при инверсии в круге. Возьмем разбиение $P3a$. В нем всегда можно выбрать окружность с центром в начале координат, описанную вокруг правильного декагона с вершинами чередующихся типов (рис. 5, *b*, слева). Отразим в этом круге внешнюю часть разбиения $P3a$. Получим внутреннюю часть разбиения $P3b$, ограниченную окружностью, проходящей через вершины чередующихся типов. Вернемся к рассмотрению разбиения $P3a$. В нем всегда можно выбрать произвольный узел типа *B*. При увеличении масштаба рассмотрения вокруг него всегда можно найти область, ограниченную аналогичной окружностью (рис. 4). Следовательно, если осуществить отражение в круге, сдвиг и поворот, то внешняя часть разбиения $P3a$, ограниченная первой окружностью, полностью совместится с внутренней частью того же самого разбиения, но ограниченного второй такой же окружностью, только смещенной относительно центра и проведенной вокруг узла альтернативного типа (рис. 8, *a*). Соотношение диаметров этих двух окружностей принципиальной роли не играет. Аналогичное рассмотрение можно провести как для внешней, так и для внутренней области вокруг любого узла.

Утверждение. Фрактальное разбиение Пенроуза полностью совмещается само с собой, если последовательно осуществить инверсию в круге, поворотную гомотетию (операцию подобия) и некоторую трансляцию таким образом, чтобы совместить по пять чередующихся

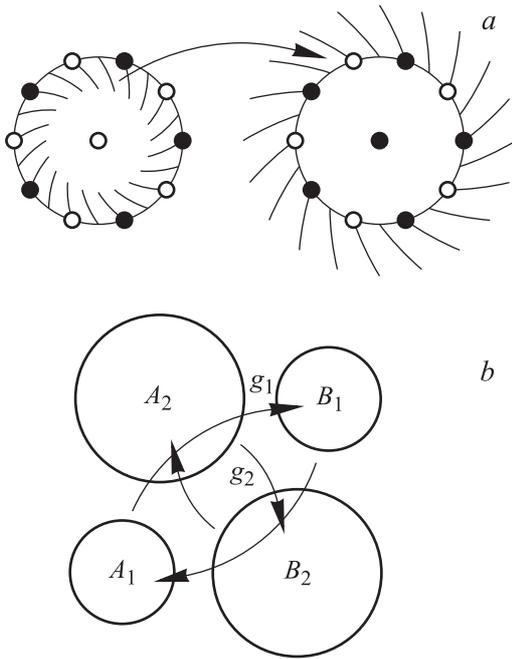


Рис. 8. Группы Шоттки. Отображение интерьера на экстерьер для пары жордановых кривых (a) и порождающие диски Шоттки (b).

вершин двух правильных декагонов произвольных размеров с центрами в узлах двух альтернативных типов.

Нет принципиальной разницы между фрактальными разбиениями $P3a$ и $P3b$. Это одно и то же разбиение, различие только в сдвиге начала координат. Ясно, что группа симметрии фрактального разбиения Пенроуза является конечно порожденной [18] и для генерации всего фрактального множества узлов достаточно задать лишь конечное число порождающих элементов. В классическом разбиении Пенроуза на плитки конечного размера выберем пару узлов A_1 и B_1 . Выберем вокруг них две непересекающиеся окружности, проходящие через десять узлов альтернативных типов (по пять узлов каждого типа). Установим преобразование Мёбиуса, отображающее интерьер первой окружности на экстерьер второй окружности и наоборот. Это отображение будет служить первым порождающим элементом g_1 . Возьмем еще одну пару узлов A_2 и B_2 . Получим еще один порождающий элемент g_2 (рис. 8, b). Продолжим так до тех пор, пока группа не будет задана полностью. Но эта процедура есть не что иное, как алгоритм генерации групп Шоттки [17].

Эти группы были впервые введены в рассмотрение немецким математиком Фридрихом Шоттки в 1877 г. Удивительно, но для исследователей, специализирующихся в области физики твердого тела, его идеи уже более сотни лет остаются практически невостребованными в отличие от работ его сына Вальтера Шоттки. В настоящее время доказано, что хаусдорфова размерность предельного множества для любой группы Шоттки всегда

меньше двух, т.е. все они описывают фракталы. Группы отличаются большим разнообразием и чрезвычайной запутанностью и сложностью, что долгое время сдерживало их систематические исследования, и лишь использование возможностей компьютерной графики сдвинуло исследования с мертвой точки. Существо проблемы наиболее наглядно раскрывает цитата из монографии [17]. В ней отмечается, что этот вид симметрии характерен для „семейства необычайно симметричных форм, которые возникают, когда двум спиральным движениям весьма специального типа позволено взаимодействовать. Эти формы отражают запутанную фрактальную сложность в любых масштабах, от очень больших до очень малых. Их визуализация образует часть столетней мечты великого немецкого геометра Феликса Клейна. Иногда взаимодействие двух спиральных движений достаточно регулярно, иногда это тотальный беспорядок, а иногда — и это наиболее интригующий случай — это структуры, раскачивающиеся как на качелях, слой за слоем, уровень за уровнем, на самой грани хаоса“.

Напомним определение. Зафиксируем произвольную точку P на римановой сфере. Любая жорданова кривая, не проходящая через эту точку, разделит риманову сферу на две части. Назовем „интерьером“ часть, не содержащую точку P , а „экстерьером“ — остальную часть. Предположим, что существует $2n$ непересекающихся жордановых кривых $A_1, B_1, \dots, A_n, B_n$ на римановой сфере с непересекающимися интерьерами. Если существуют преобразования Мёбиуса, отображающие экстерьер A_i на интерьер B_i , то группа, генерируемая этими преобразованиями, является группой Клейна. Группами Шоттки называются такие группы Клейна, которые могут быть сгенерированы указанным способом.

Группы Шоттки — это конечно порожденные свободные группы, такие, что все их нетривиальные элементы являются локсодромными. Фундаментальный домен для действия группы Шоттки на римановой сфере задается экстерьером жордановой кривой, ее порождающей.

У т в е р ж д е н и е. Симметрия фрактального разбиения Пенроуза описывается группой Шоттки.

Аналогичную процедуру можно применить для описания групп симметрии трехмерных икосаэдрических квазикристаллов, только вместо окружностей следует взять сферы. Результаты планируется представить в отдельной работе. В монографии [17] приводится древний миф о паутине Индры. „Говорят, в раю великого бога Индры есть бесконечная мерцающая сеть тоньше паутины, простирающаяся до самых дальних границ пространства. В каждом пересечении натянутых прозрачных нитей находится зеркально-гладкая жемчужина. Так как паутина бесконечно велика, число жемчужин бессечно. В блестящей поверхности каждой жемчужины отражаются все другие жемчужины, вплоть до тех, что находятся в самых отдаленных уголках рая. В каждом отражении вновь отражается все бесчисленное множество остальных жемчужин, так что этот процесс — отражение отражений — длится без конца“. Отражения сфер в сферах

образуют группу, трехмерный аналог группы Шоттки. Вероятно, это образное описание может служить одной из самых ярких и наглядных иллюстраций симметрии икосаэдрических квазикристаллов.

5. Симметрия конструктивных фракталов

Разбиение Пенроуза является самым известным, но далеко не единственным аперриодическим разбиением. В качестве примеров можно привести такие разбиения, как димер, цевочное колесо (pinwheel), сфинкс, полугексакон (half-hex), треугольник Робинсона, треугольник Данцера и др. (см., например, [19]). Мотивация для поиска все новых форм упаковываемых субъединиц, а также правил их упорядочения черпается из необходимости решения конкретных проблем физики твердого тела. Локальные правила могут отражать природу энергетических взаимодействий в физических системах и проявляться в результате самосборки субъединиц в упорядоченную, но неперриодическую структуру. В материаловедении субъединицы могут представлять кластеры из нескольких атомов или еще большие строительные блоки. Блоки могут иметь сложную форму или особенности на поверхности, предопределяющие то, каким образом они могут быть объединены вместе. Выяснение общих принципов, на которых базируются все аперриодические упаковки, позволило бы упростить задачу физической реализации таких материалов [20].

Формализм, предложенный в [6] и развитый в настоящей работе, может быть с равным успехом применен для описания симметрии аперриодических разбиений, не обладающих симметрией пятого порядка. На рис. 9, *a* представлено разбиение „димер“. Для его генерации следует взять плитку в форме прямоугольника с соотношением сторон 2 : 1 и заполнить ее четырьмя собственными уменьшенными копиями. Повторив операции инфляции и дефляции, получим закономерное заполнение всей плоскости одинаковыми плитками с одинаковым локальным окружением, но без трансляционной инвариантности. Проведем измельчение до бесконечности. Получим фрактальное разбиение, обладающее симметрией подобия. Четыре порождающих элемента с четырьмя разными особыми точками генерируют целиком всю фрактальную аперриодическую квазирешетку. Геодезическими поворотной гомотетии являются логарифмические спирали. Последовательно уменьшающиеся копии исходной области для одного из четырех порождающих элементов группы выделены на рисунке темным цветом.

На рис. 9, *b* представлено разбиение „цевочное колесо“. Для его генерации следует взять плитку в форме прямоугольного треугольника с соотношением катетов 2 : 1 и заполнить его пятью уменьшенными копиями. Пять элементов подобия с пятью разными особыми точками генерируют квазирешетку. Геодезическими поворотной гомотетии (при этом, вообще говоря, не

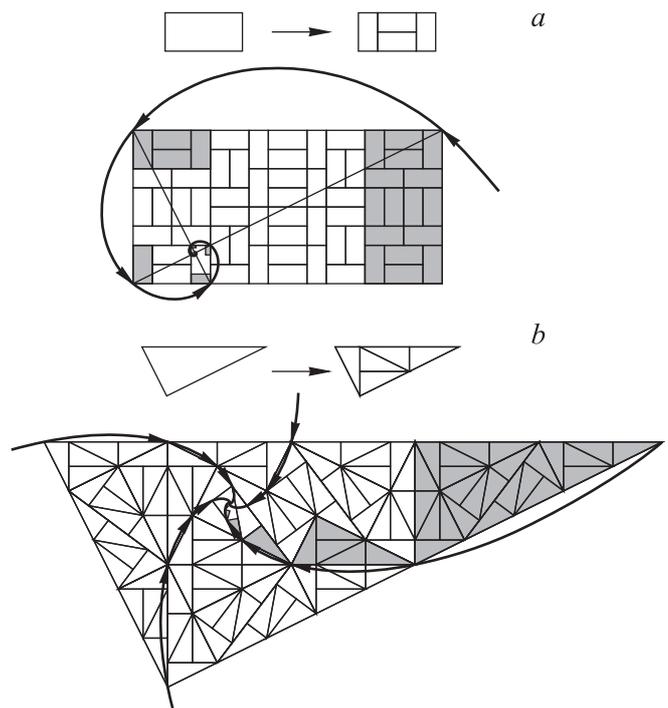


Рис. 9. Примеры аперриодических разбиений. Геодезические порождающих элементов имеют форму логарифмических спиралей. Разбиения „димер“ (*a*) и „цевочное колесо“ (*b*).

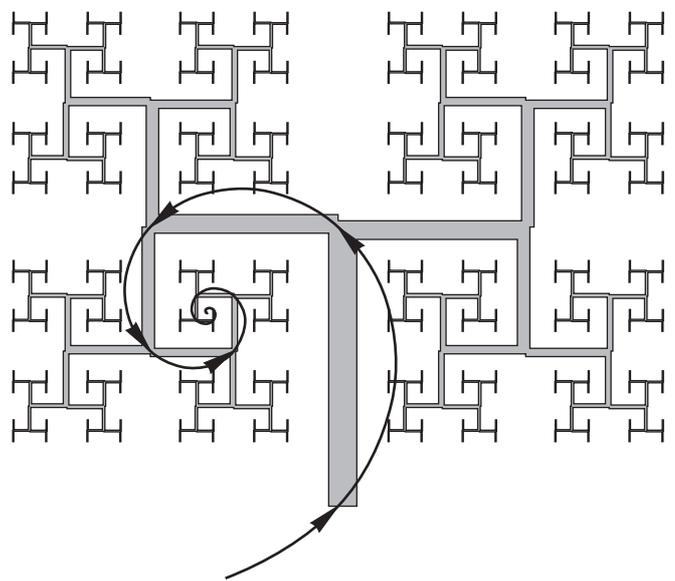


Рис. 10. Дерево Манделброта как пример конструктивного фрактала. Изображена геодезическая одного из порождающих элементов.

исключены повороты второго рода) являются вновь логарифмические спирали. Последовательно уменьшающиеся копии исходной области для одного из пяти генераторов группы выделены на рисунке темным цветом.

Очевидно, что фундаментальные принципы, лежащие в основе всех аперриодических разбиений, одинаковы. Те

же самые принципы можно использовать для генерации некоторых конструктивных фракталов. На рис. 10 приведен один из классических примеров — дерево Мандельброта [11]. Берется некая стартовая геометрическая фигура в форме „ветвей“. Ее линейные размеры уменьшаются в 1.5 раза, полученные таким способом две уменьшенные копии подсоединяются к более толстым ветвям первоначальной фигуры. После бесконечно большого числа итераций дерево заполняет всю плоскость, а ствол разветвляется до бесконечно малых „веточек“, так что результирующая фигура обладает симметрией подобия. Дерево Мандельброта может быть получено при помощи двух генераторов поворотной гомотетии с двумя несовпадающими особыми точками. Для описания его симметрии также можно использовать преобразование Мёбиуса.

Вероятно, любой аперiodический кристалл можно описать в терминах групп Шоттки и дробно-линейных преобразований комплексной плоскости. Корректно говорить не только о фрактальном разбиении Пенроуза [10], но и о введении фрактальных прототипов для любых аперiodических кристаллов, а их свойства классифицировать по симметрии соответствующих фрактальных идеализаций.

6. Заключение

Показано, что симметрия разбиения Пенроуза описывается группами Шоттки; в теории аперiodических кристаллов они должны играть ту же роль, что группы Федорова в теории кристаллических решеток. Аперiodические кристаллы обладают свойством самоинверсности, которую следует понимать в расширенном смысле — как результат композиции инверсии с поворотной гомотетией и трансляциями, в то время как само по себе отражение в круге может отсутствовать как самостоятельный элемент симметрии. Показано, что правила локального соответствия для фрактального разбиения Пенроуза базируются на едином алгоритме генерации последовательности Фибоначчи.

Список литературы

- [1] В.Я. Шевченко, Г.В. Жижин, А.Л. Маккей. Изв. АН. Сер. хим. 2, 269 (2013).
- [2] W. Steurer, S. Deloudi. Crystallography of quasicrystals: Concepts, methods and structures. Springer (2009). 384 p.
- [3] R. Lifshitz. Israel J. Chem. **51**, 11–12, 1156 (2011).
- [4] I. Hargittai. J. Mol. Struct. **976**, 81 (2010).
- [5] Ю.Х. Векилов, М.А. Черников. УФН **180**, 6, 561 (2010).
- [6] А.Е. Мадисон. ФТТ **55**, 4, 784 (2013).
- [7] N.G. de Bruijn. Proc. Kon. Nederl. Akad. Wetensch. A **84**, 39 (1981).
- [8] Л.С. Левитов. ЖЭТФ **93**, 5, 1832 (1987).
- [9] M. Senechal. Quasicrystals and geometry. Cambridge University Press (1995). 286 p.
- [10] C. Bandt, P. Gummelt. Aequ. Math. **53**, 295 (1997).
- [11] Б. Мандельброт. Фрактальная геометрия природы. Институт компьютерных исследований, М. (2002). 656 с.
- [12] F. Gähler. J. Non-Cryst. Solids **153–154**, 160 (1993).
- [13] H.C. Jeong, P.J. Steinhardt. Phys. Rev. B **55**, 6, 3520 (1997).
- [14] E.A. Lord, S. Ranganathan. Acta Cryst. A **57**, 531 (2001).
- [15] P. Gummelt. Geom. Dedicata **62**, 1, 1 (1996).
- [16] Г.С.М. Кокстер. Введение в геометрию. Наука, М. (1966). 648 с.
- [17] D. Mumford, C. Series, D. Wright. Indra's pearls: The vision of Felix Klein. Cambridge University Press (2002). 395 p.
- [18] Ле Ты Куок Тханг, С.А. Пиунихин, В.А. Садов. УМН **48**, 1, 41 (1993).
- [19] C. Goodman-Strauss. Ann. Math. **147**, 1, 181 (1998).
- [20] J.E.S. Socolar, J.M. Taylor. Math. Intelligencer **34**, 1, 18 (2012).