ЛОКАЛЬНЫЕ ПРАВИЛА И ИХ СВЯЗЬ С ГЛОБАЛЬНОЙ ОРГАНИЗАЦИЕЙ СТРУКТУРЫ

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

Глубокое исследование локальных условий в кристаллических структурах было предпринято еще накануне 20-го столетия в работах Федорова, Минковского, Вороного. Важные результаты, относящиеся к описанию локальных свойств кристаллографических кластеров были получены в школе Б.Н.Делоне в конце прошлого века. В лекции будет дано определение понятия "локального правила" и изложен ряд "локальных" результатов, относящихся к кристаллическим и квазкристаллическим структурам.

Множество X называется (r, R)-*системой* или *множеством Делоне* (r и R – положительные числа), если для него выполняются два условия:
(1) любой открытый шар B_r радиуса r содержит не более одной точки из X

$$|B_r \cap X| \leq 1; \qquad (r)$$

(2) любой замкнутый шар $\bar{B}_R$ радиуса R содержит не менее одной точки из X

$$|\bar{B}_R \cap X| \geq 1. \qquad (R)$$

Понятие множества Делоне (или (r, R)-системы) является наиболее общей математической абстракцией для описания позиций атомов в твердом теле. Параметры r и R можно интерпретировать как радиусы упаковки и, соответственно, покрытия пространства равными шарами. Действительно, шары радиуса r, центры которых размещены в точках из X, попарно не перекрываются, т.е. образуют r-упаковку. В то же время шары радиуса R, центрированные в тех же точках покрывают все пространство, т.е. образуют R-покрытие. Множество Делоне однозначно порождает разбиение Вороного и разбиение Делоне. Легко видеть, что каждая область Вороного разбиения есть выпуклый многогранник (если X на плоскости, то многоугольник), внутри которого можно разместить шар радиуса r, а сам многогранник Вороного можно поместить в шар радиуса R.

Группа всех движений пространства, совмещающих множество X с собой, называется группой симметрий $Sym(X)$ множества X. Так как множество Делоне дискретно, то его группа симметрий $Sym(X)$ также является дискретной. Если группа $Sym(X)$ при этом кристаллографическая, то есть имеет ограниченную фундаментальную область, то X называется *кристаллом.* Это определение кристалла эквивалентно тому, что кристалл является орбитой конечного числа точек относительно некоторой кристаллографической группы. Частным случаем кристалла является *правильная* система точек, которая, по определению, является орбитой какой-нибудь точки. Частным случаем правильной системы является *точечная решетка* – орбита точки относительно трансляционной группы. В силу теоремы Шенфлиса-Бибербаха о существовании в кристаллографической группе трансляционной подгруппы, любой кристалл является объединением конечного числа попарно параллельных и конгруэнтных друг другу решеток.

Важной характеристикой, выделяющей среди множеств Делоне кристаллы и другие достаточно симметричные структуры, является *перечисляющая функция* множества Делоне. Но сначала определим множества Делоне *конечного типа.* Рассмотрим для данного ρ и данного $x \in X$ ρ-окрестность точки $U_x(\rho) = B_x(\rho) \cap X$. Если во множестве X для каждого значения $\rho > 0$, число попарно неконгруэнтных окрестностей $U_x(\rho)$ конечно для любого ρ, то говорят, что X – множество *конечного типа*. В этом случае можно ввести *перечисляющую функцию* $N_X(\rho)$ как число попарно неконгруэнтных окрестностей во множестве $\{U_x(\rho)|x \in X\}$. Перечисляющая функция – неубывающая, целочисленная и, значит, ступенчатая функция.

Конечная коллекция дискретных множеств $\{Y_i\}$, содержащих начало O и содержащихся в шаре некоторого радиуса ρ_0, называется *локальным правилом* $\mathcal{LR}$. Множество Делоне X *подчиняется локальному правилу* $\mathcal{LR}$, если окрестность $U_x(\rho_0)$ каждой точки $x \in X$ конгруэнтна некоторому множеству $Y_i \in \mathcal{LR}$.

В лекции предполагется сформулировать известные соотношения между степенью симметрии структруры и соответствующими ей локальным правилом и перечисляющей функцией.

Работа отчасти поддержана грантом РФФИ 06-01-90845-Мол-а