ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1289–1299

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 514.17+514.87

О КРИСТАЛЛОГРАФИЧНОСТИ ЛОКАЛЬНЫХ ГРУПП МНОЖЕСТВА ДЕЛОНЕ В ЕВКЛИДОВОЙ ПЛОСКОСТИ

Н. П. Долбилин[1],*, М. И. Штогрин[1],**

[1] 119991 Москва, ул. Губкина, 8, Математический институт им. В.А. Стеклова РАН, Россия

**e-mail: dolbilin@mi-ras.ru*

***e-mail: stogrin@mi-ras.ru*

Поступила в редакцию 11.10.2021 г.
Переработанный вариант 02.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Доказывается, что в любом множестве Делоне на евклидовой плоскости подмножество точек с кристаллографической локальной группой, т.е. с локальными поворотами порядка $n = 1, 2, 3, 4$ или 6, является также множеством Делоне. Из этого результата вытекает ряд важных следствий для правильных систем и кристаллических структур. Под локальной группой в точке множества X понимается группа кластера радиуса $2R$ с центром в этой точке, где R – радиус покрытия плоскости равными кругами с центрами в X. Библ. 10. Фиг. 7.

Ключевые слова: множество Делоне, кластер, группа кластера, локальная группа.

DOI: 10.31857/S004446692208004X

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах Б.Н. Делоне [1]–[3] было введено и изучено понятие (r, R)-системы, которое сейчас называют множеством Делоне. С помощью множеств Делоне описывают микроструктуру любого твердого вещества, как аморфного, так и кристаллического. Строение кристалла, в отличие от микроструктуры аморфного вещества, обладает высокой симметрией в целом, которая является кристаллографической группой. В дальнейшем была построена локальная теория правильных систем, заложенная в [4]. Был доказан ряд теорем, в которых “глобальный порядок” в кристалле (т.е. наличие в нем кристаллографической группы симметрий) выводится из попарной идентичности его кластеров некоторого радиуса. В локальной теории важную роль играет наличие у кластеров симметрий или их отсутствие. Подчеркнем, что речь идет лишь о симметриях, действующих на множестве в пределах кластера и не обязанных входить в группу симметрий множества Делоне в целом.

В случае трехмерного пространства М.И. Штогрин (см. [5]) показал, что в $2R$-изометричном множестве Делоне, где R – радиус покрытия, кластеры (или “паучки”) радиуса $2R$ не могут содержать вращений выше 6-го порядка. Этот результат, полученный в конце 1970-х гг. и опубликованный лишь в 2010 г., оказался важным для получения верхней оценки $\hat{\rho}_3 \le 10R$ для радиуса регулярности $\hat{\rho}_3$ в трехмерном пространстве (см. [6], [7]).

Недавно Н.П. Долбилин (см. [8], [9]) доказал утверждения, верные для совершенно произвольных множеств Делоне без каких-либо дополнительных условий, из которого следует утверждение Штогрина для множеств с одинаковыми $2R$-кластерами. В частности, в [9] из произвольного множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^3$ было выделено подмножество $\tilde{X}$ всех тех точек из X, в которых порядок локальной оси не превосходит 6. Было доказано, что подмножество $\tilde{X}$ является также множеством Делоне, для которого значение радиуса покрытия $\tilde{R}$, вообще говоря, превосходит радиус покрытия R для X. Отсюда следует, что в множестве X с одинаковыми $2R$-кластерами у всех точек локальные группы не содержат вращений выше 6-го порядка, т.е. $X = \tilde{X}$.

Этот результат подсказал направление исследований локальных групп в произвольных множествах Делоне на плоскости и в 3D-пространстве.

Так, в [9] были высказаны две гипотезы. Одна, общая, гипотеза утверждает, что в произвольном множестве Делоне $X(\subset \mathbb{R}^3)$ подмножество X_{cr} всех точек x из X, в которых локальные вращения имеют только кристаллографический порядок n, т.е. $n = 1, 2, 3, 4, 6$, является множеством Делоне.

Согласно другой, ослабленной, гипотезе (см. [9]), для $2R$-изометрического множества $X \subset \mathbb{R}^3$ локальные группы (которые в этом случае все попарно сопряжены) не содержат осей некристаллографического порядка n, т.е. нет осей порядков $n = 5$ и $n > 6$. Очевидно, что справедливость ослабленной гипотезы следует из справедливости общей гипотезы относительно произвольных множеств Делоне. С другой стороны, ослабленная гипотеза является очень сильным обобщением классической теоремы об отсутствии глобальной оси 5-го порядка в двумерной и трехмерной решетках.

Обратим внимание на то, что обобщение происходит сразу по двум направлениям. Во-первых, речь идет о невозможности не только глобальных осей 5-го порядка, но и локальных. Во-вторых, семейство $2R$-изометричных множеств, о которых говорится в ослабленной гипотезе, гораздо шире не только семейства решеток, но и, как следует из [10], семейства правильных систем (определение см. ниже).

Основная цель настоящей работы — доказать упомянутую выше общую гипотезу для случая плоскости (теорема 2.1).

2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ. ОСНОВНОЙ РЕЗУЛЬТАТ

Приведем несколько необходимых определений (подробнее см., например, [6]).

Определение 2.1 (множество Делоне). Множество $X \subset \mathbb{R}^2$ называется *множеством Делоне* типа (r, R), где $r, R > 0$, если выполнены следующие два условия:

(1) в открытом круге $B_y^o(r)$ радиуса r с центром в произвольной точке $y \in \mathbb{R}^2$ содержится не более одной точки из X:

$$\left|X \cap B_y^o(r)\right| \leq 1;$$

(2) в замкнутом круге $B_y(R)$ содержится не менее одной точки из X:

$$\left|X \cap B_y(R)\right| \geq 1.$$

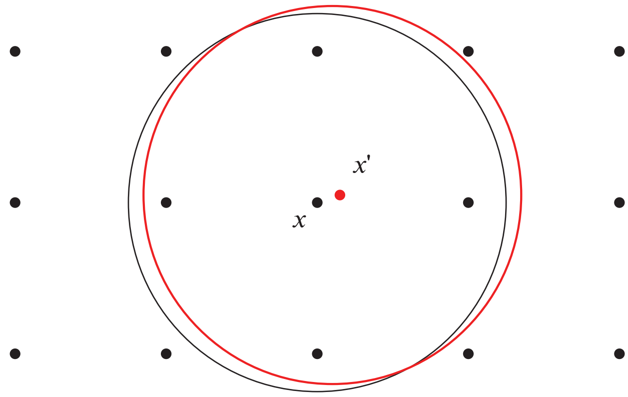
Ясно, что $r < R$. Более того, из определения 2.1 следует, что для данного множества Делоне X оба неравенства (1) и (2) выполняются и для r', и для R', если $r' < r$ и $R' > R$. Поэтому будем считать, что в качестве r и R выбраны соответственно наибольшее и наименьшее возможные для данного множества X значения. Другими словами, если X — фиксированное множество центров кругов, то под r понимается наибольший радиус упаковки плоскости $\mathbb{R}^2$ равными кругами с центрами в X, а под R — наименьший радиус покрытия плоскости $\mathbb{R}^2$ равными кругами с центрами в X.

Определение 2.2 (правильная система). Множество Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ называется *правильной системой*, если для любой пары точек x, x' из X существует движение g плоскости $\mathbb{R}^2$, для которого $g(x) = x'$ и $g(X) = X$.

Из определения следует, что группа симметрий правильной системы действует транзитивно на ее точках. Решетка, построенная на некотором базисе, является частным случаем правильной системы. На решетке существует транзитивная группа, состоящая из параллельных переносов исключительно.

Определение 2.3 (кластер). Для $x \in X$ и произвольного $\rho > 0$ множество $X \cap B_x(\rho)$ назовем ρ-*кластером* точки x в множестве Делоне X и обозначим через $C_x(\rho)$. При этом два ρ-кластера $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ считаются *эквивалентными*, если существует движение g такое, что $g(x) = x'$ и $g(C_x(\rho)) = C_{x'}(\rho)$.

Отметим, что кластеры $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ двух разных точек $x \neq x' \in X$ могут совпадать как множества, но при этом могут не быть эквивалентными, потому что может не оказаться изометрии,



Фиг. 1. Пример кластеров $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$, которые совпадают теоретико-множественно, но не являются эквивалентными.

переводящей одновременно x в x' и множество в себя (фиг. 1). Мы видим, что в этом случае одно и то же множество $X \cap B_x(\rho)$ $(= X \cap B_{x'}(\rho))$ окружает две свои точки x и x' по-разному.

Определение 2.4 (группа кластера). Для данной точки $x \in X$ *группой кластера* $C_x(\rho)$ называется группа $S_x(\rho)$ всех изометрий s плоскости таких, что $s(x) = x$ и $s(C_x(\rho)) = C_x(\rho)$.

При $\rho < 2r$ для каждой точки $x \in X$ ρ-кластер $C_x(\rho)$ состоит из единственной точки – точки x и группа $S_x(\rho) = O_x(2)$ – ортогональная группа $O(2)$ с неподвижной точкой x. Далее, для каждой точки x группа $S_x(\rho)$ не возрастает и может только уменьшаться с ростом радиуса ρ. Так как при $\rho = 2R$ кластер $C_x(2R)$ вокруг любой точки множества Делоне (это верно в пространстве любой размерности) является полномерным, то его группа $S_x(2R)$ является конечной. Для случая плоскости конечность группы $S_x(\rho)$ для любой точки $x \in X$ достигается уже при $\rho = 2r$.

Определение 2.5 (локальная группа). Группу $2R$-кластера $C_x(2R)$ назовем *локальной группой в точке* x и обозначим $S_x(2R) := G_x$. Вращение из локальной группы (если не сказано иное) будем называть *локальным вращением*, имея в виду, что это вращение, ограниченное на шар $B_x(2R)$, оставляет кластер $C_x(2R)$ инвариантным.

Множество всех собственных вращений (плоскости вокруг точки x) группы G_x составляет циклическую подгруппу, порядок которой обозначим через n_x. Напомним, что эти вращения, вообще говоря, не являются симметрией множества Делоне X в целом.

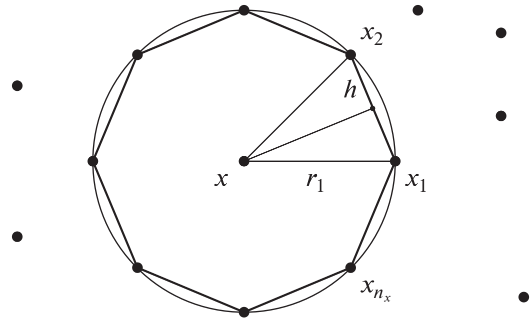
Конечные подгруппы ортогональной группы $O(2)$, содержащие вращения порядков $n = 1, 2, 3, 4$ или 6, являются кристаллографическими точечными группами, т.е. конечными подгруппами симметрий той или иной двумерной решетки.

Основной результат работы – следующая теорема.

Теорема 2.1. *Пусть* $X \subset \mathbb{R}^2$ *– произвольное множество Делоне с радиусом покрытия* R *и* X_{cr} *– подмножество всех точек* $x \in X$*, локальная группа которых кристаллографическая. Тогда подмножество* X_{cr} *является множеством Делоне с радиусом покрытия* R_{cr} *меньше* $2R$. *Более того, оценка* $R_{\text{cr}} < 2R$ *неулучшаема.*

3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ОСНОВНОГО РЕЗУЛЬТАТА

Пусть для $x \in X$, $n_x \geq 3$ и x_1 – ближайшая к x точка из X. Ясно, что $|xx_1| < 2R$. Так как $G_x \supseteq C_{n_x}$, то точка x_1 размножается поворотами из группы C_{n_x} в вершины правильного n_x-угольника $P = x_1x_2 \ldots x_{n_x}$, вписанного в окружность радиуса $r_1 = |xx_1|$ (фиг. 2). Если h – середина сто-



Фиг. 2. Орбита $C_{n_x} \cdot x_1$ ближайшей к x точки x_1; $n_x = 8$.

роны x_1x_2, то в прямоугольном треугольнике Δxhx_1 угол $\angle hxx_1 = \pi/n_x$. Так как $|hx_1| \geq r$ и $|xx_1| < 2R$, то

$$\sin\frac{\pi}{n_x} = \frac{|hx_1|}{|xx_1|} > \frac{r}{2R},$$

откуда получаем

$$n_x < \frac{\pi}{\arcsin\frac{r}{2R}}. \quad (1)$$

Вообще говоря, на расстоянии r_1 от x может находиться k орбит (относительно группы C_{n_x}) точек из X, ближайших к x, где $k \geq 1$. Эти точки являются вершинами выпуклого kn_x-угольника, вписанного в окружность радиуса r_1. Его наименьшая сторона не превышает стороны правильного выпуклого kn_x-угольника, вписанного в ту же окружность. В силу (1) в общем случае имеем $kn_x < \pi/\arcsin r/(2R)$.

Лемма 3.1. *Пусть точка $x_1 \in X$ является ближайшей к точке $x \in X$. Если $n_x \geq 7$, то $n_{x_1} \leq 2$.*

Доказательство. Если x_1 – ближайшая к x точка из X, то $|xx_1| < 2R$. Поэтому $x_1 \in C_x(2R)$. Все точки из X, эквивалентные точке x_1 относительно группы $C_{n_x} \subseteq G_x$, являются вершинами правильного выпуклого n_x-угольника $P = x_1x_2 \ldots x_{n_x}$, вписанного в окружность радиуса $|xx_1|$.

Угол $\angle x_2x_1x_{n_x}$ в n_x-угольнике P равен $(n_x - 2)\pi/n_x$. Длина стороны $|x_1x_2| = 2|xx_1|\sin(\pi/n_x)$. Так как $n_x \geq 7 > 6$, то $|x_1x_2| < |xx_1| < 2R$. Таким образом, $x_2 \in C_{x_1}(2R)$.

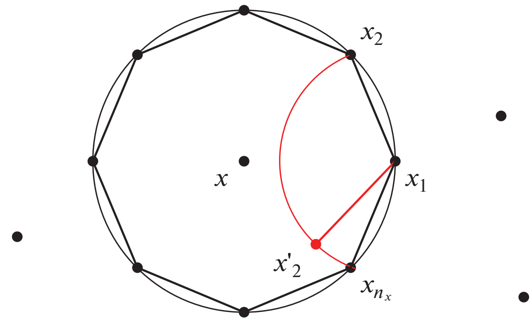
Предположим противное: $n_{x_1} \geq 3$. Повернем точку x_2 вокруг x_1 на угол $2\pi/n_{x_1}$ (такой поворот принадлежит группе G_{x_1}) в сторону точки x. Так как $n_x \geq 7$ и $n_{x_1} \geq 3$, то

$$\angle x_2x_1x_2' = \frac{2\pi}{n_{x_1}} < \frac{(n_x - 2)\pi}{n_x} = \angle x_2x_1x_{n_x}.$$

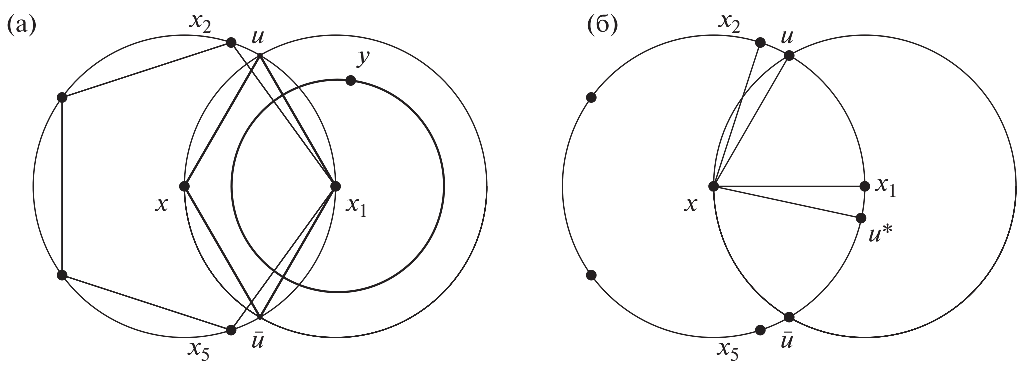
Поэтому поворот точки x_2 на угол, не превосходящий $2\pi/3$, оставляет ее образ x_2' на дуге $x_2x_2'x_{n_x}$ (фиг. 3), находящейся внутри $\angle x_2x_1x_{n_x}$ многоугольника P. Отсюда получаем $|xx_2'| < |xx_1|$. С другой стороны, так как $|x_1x_2'| = |x_1x_2| < |x_1x|$, то $x_2' \neq x$. Получаем противоречие с тем, что $x_1 \in X$, по нашему выбору, точка ближайшая к x. Это доказывает, что в локальной группе G_{x_1} порядок вращения не превышает 2: $n_{x_1} \leq 2$.

Лемма 3.2. *Для данной точки $x \in X$ пусть $x_1 \in X$ – ближайшая к ней точка. Если $n_x = 5$, то $n_{x_1} \leq 3$.*

Доказательство. Точки множества X, эквивалентные точке x_1 относительно группы $C_{n_x} \subseteq G_x$, образуют вершины правильного выпуклого 5-угольника $x_1x_2x_3x_4x_5$, вписанного в окружность с центром x и радиуса $|xx_1| < 2R$. Окружности радиуса $|xx_1|$ с центрами x и x_1 соответственно пере-



Фиг. 3. Иллюстрация к лемме 3.1 при $n_x \geq 7$, $n_{x_1} \geq 3$.



Фиг. 4. Иллюстрация к лемме 3.2 при $n_x = 5$: (а) – случай 1, (б) – случай 2, $n_{x_1} = 6$.

секаются в точках u и $\bar{u}$, симметричных относительно прямой xx_1. Будем считать, что точка u ближе к x_2, чем к x_5, а $\bar{u}$, наоборот, ближе к x_5.

Несмотря на то что точка x_1 – ближайшая к x, точка x не обязана быть ближайшей к x_1. Поэтому исследование значения n_{x_1} разделим на два случая.

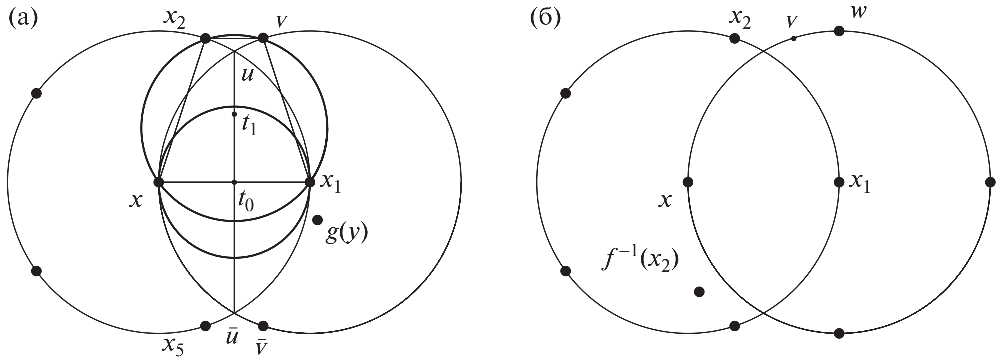
Случай 1: точка x не является ближайшей к x_1 в множестве X.

Случай 2: точка x является ближайшей к x_1 в множестве X.

Доказательство случая 1. Пусть внутри круга с центром x_1 и радиуса $|x_1x|$ помимо x_1 имеется хотя бы еще одна точка из X. Обозначим ее через y (фиг. 4а). Так как $|x_1y| < |x_1x| = |xu|$, то дуга окружности с центром x_1 и радиусом $|x_1y|$, расположенная внутри круга с центром x и радиуса $|xx_1|$, не содержит ни одной точки из множества X. С другой стороны, эта дуга больше $2\pi/3$, так как пересекается со сторонами угла $ux_1\bar{u} = 2\pi/3$ ромба $xux_1\bar{u}$ с вершиной x_1. Таким образом, угол локального поворота вокруг x_1 больше $2\pi/3$. Следовательно, $n_{x_1} \leq 2$.

Доказательство случая 2. Если точка x является ближайшей к точке x_1, тогда внутри окружности радиуса $|x_1x|$ с центром x_1 нет других точек из множества X кроме центра x_1. Внутри дуги $ux\bar{u}$, расположенной внутри окружности радиуса $|xx_1|$ с центром x, содержится лишь одна точка из X, и эта точка – точка x. Следовательно, $n_{x_1} \leq 6$. Докажем методом от противного, что $n_{x_1} \neq 4, 5, 6$.

Пусть $n_{x_1} = 6$, т.е. в группе G_{x_1} имеются повороты вокруг точки x_1 на угол $\pm\pi/3$, при которых точка x переходит в точки u и $\bar{u}$ (фиг. 4б). Таким образом, если $n_{x_1} = 6$, то точки пересечения окружностей u, $\bar{u}$ принадлежат кластеру $C_x(2R)(\subset X)$. Так как $n_x = 5$, в G_x имеются повороты во-



Фиг. 5. Иллюстрация к лемме 3.2 при $n_x = 5$: (а) – случай 2, $n_{x_1} = 5$; (б) – случай 2, $n_{x_1} = 4$.

круг точки x на углы $\pm 2\pi/5$. При одном из них точка x_2 переходит в x_1, а точка u переходит в точку $u^* \in C_x(2R)$. Так как

$$\angle x_1xu^* = \angle x_2xu = 2\pi(1/5 - 1/6) = \pi/15,$$

точка u^* расположена внутри дуги $x_1\bar{u}$ с центральным углом $\angle x_1x\bar{u} = \pi/3$. Следовательно, для точки $u^* \in X$ имеем $|x_1u^*| < |x_1x|$, что противоречит основному условию случая 2: внутри круга радиуса $|x_1x|$ с центром x_1 других точек из X кроме x_1 нет. Итак, доказано, что $n_{x_1} \neq 6$.

Пусть $n_{x_1} = 5$. Тогда при повороте вокруг точки x_1 на угол $2\pi/5$ точка x перейдет в точку v, зеркально симметричную точке x_2 относительно прямой $u\bar{u}$ (фиг. 5а).

Рассмотрим круг $B(x, x_2, v, x_1)$, описанный около равнобочной трапеции xx_2vx_1. Если круг $B(x, x_2, v, x_1)$ внутри пуст от точек из X, то его радиус не превышает R. Отсюда следует, что для точки v расстояние $|xv| \leq 2R$. Более того, $|x_2v| < |xx_1|$.

Если же круг $B(x, x_2, v, x_1)$ содержит внутри точки из X, то нельзя утверждать, что его радиус не превышает R. Следовательно, мы не можем утверждать, что $|xv| \leq 2R$. Тем не менее мы покажем, что в любом случае среди точек, лежащих внутри этого круга, найдется точка $y \in X$ такая, что $|xy| \leq 2R$ и $|x_2y| < |xx_1|$.

Обозначим через $B(x, x_1)$ круг, построенный на отрезке $[xx_1]$ как на диаметре. Очевидно, что в силу свойств кругов $B_x(|xx_1|)$ и $B_{x_1}(|xx_1|)$, внутри круга $B(x, x_1)$ нет точек из X. Более того, на границе этого круга имеются лишь две (диаметрально противоположные) точки x и x_1 из X.

Пусть t_0 – центр круга $B(x, x_1)$ и t_1 – центр круга $B(x, x_2, v, x_1)$. Рассмотрим семейство кругов $\{B_t(|tx|), t \in [t_0, t_1]\}$, где $B_t(|tx|)$ – круг с центром в точке t и радиусом $|tx|$. Следовательно, отрезок $[xx_1]$ является хордой круга $B_t(|tx|)$. Радиус $|tx|$ круга $B_t(|tx|)$ растет вместе с удалением центра t от t_0.

Пусть t^* – ближайшая к t_0 точка отрезка $[t_0, t_1]$, для которой круг $B_{t^*}(|t^*x|)$ содержит хотя бы еще одну точку из X. Такая точка t^* найдется на отрезке $[t_0, t_1]$, так как для точки t_1 окружность $\partial B_{t_1}(|t_1x|)$ помимо x и x_1 содержит, по крайней мере, две другие точки x_2 и v из X.

Внутри круга $B_{t^*}(|t^*x|)$ нет точек из X, поэтому его радиус не превосходит R. На окружности $\partial B_{t^*}(|t^*x|)$ находятся концы x и $x_1 \in X$ хорды и хотя бы одна “новая” точка $y \in X$. Поэтому $|xy| \leq 2R$.

Отметим, что мы можем считать точку y не совпадающей с x_2. Действительно, если $t^* \neq t_1$, то $y \neq x_2$, так как $x_2 \in \partial B_{t_1}(|t_1x|)$. Если $t^* = t_1$, то на окружности $\partial B_{t_1}(|t_1x|)$ находятся две точки x_2 и v из X. В этом случае мы можем взять $y := v$.

Далее, так как внутри окружностей $\partial B_x(|xx_1|)$ и $\partial B_{x_1}(|xx_1|)$ кроме их центров нет других точек из X, то новая точка $y \in \partial B_{t^*}(|t^*x|)$ принадлежит криволинейному треугольнику x_2vu, образованному дугами трех окружностей: $\partial B(x, x_2, v, x_1)$, $\partial B_x(|xx_1|)$ и $\partial B_{x_1}(|xx_1|)$, $y \neq x_2$ (фиг. 5а). Легко проверить, что

$$|x_2v| = \max_{z \in \Delta x_2vu} |x_2z| = (1 - 2\cos 72°)|xx_1| < 0.382|xx_1|. \quad (2)$$

Так как $|xy| \leq 2R$, то поворот $g \in G_x$ вокруг точки x на 72°, при котором x_2 переходит в x_1, перемещает точку y в $g(y)$ (фиг. 5а). Из того, что $x_1 = g(x_2)$ и $y \in \Delta x_2vu$, следует

$$|x_1g(y)| = |x_2y| \leq |x_2v| < 0.382|xx_1|. \quad (3)$$

Таким образом, точка $g(y) \neq x_1$ и $g(y)$ лежит внутри круга $B_{x_1}(|xx_1|)$. Получили противоречие предположению о том, что внутри этого круга нет других точек из X кроме центра x_1. Доказано, что $n_{x_1} \neq 5$.

Пусть, наконец, $n_{x_1} = 4$. Тогда при повороте f вокруг точки x_1 на угол $\pi/2$ (по часовой стрелке) точка x перейдет в точку w, близкую к v и расположенную на продолжении дуги xv (фиг. 5б). Легко проверить, что $|x_2w| < |x_1w| = |x_1x|$.

Заметим, что хотя точка v в случае $n_{x_1} = 4$ не обязана принадлежать множеству X, но, как и в предыдущем пункте ($n_{x_1} = 5$), круги $B_x(|xx_1|)$ и $B_{x_1}(|x_1x|)$ кроме своих центров не содержат внутри себя других точек из X. Поэтому с помощью тех же аргументов, что и в предыдущем пункте, доказывается, что круг $B(x, x_2, v, x_1)$ пуст внутри от точек из X. Значит, $|x_1x_2| \leq 2R$.

Тогда под действием $f^{-1} \in G_{x_1}$ точка w возвращается в x. А в силу $|x_2w| < |xx_1|$, точка x_2 перейдет в точку $f^{-1}(x_2) \in X$, расположенную внутри круга $B_x(|xx_1|)$. Получено противоречие с тем, что точка x_1 является ближайшей к точке x. Следовательно, $n_{x_1} \neq 4$. Лемма 3.2 доказана.

Следствие. Пусть для множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ и всех точек $x \in X$ их $2R$-кластеры $C_x(2R)$ попарно эквивалентны и циклическая группа C_n – подгруппа всех вращений группы G_x. Тогда порядок группы C_n равен $n = 1, 2, 3, 4$ или 6.

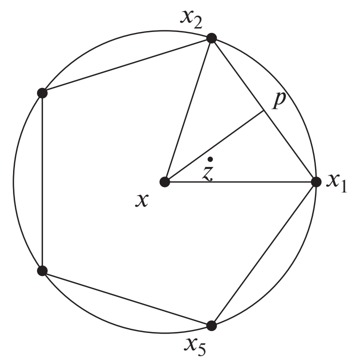
В частности, в любой правильной системе точек X на плоскости для любой точки $x \in X$ подгруппа C_n вращений локальной группы G_x имеет один и тот же для данного множества X порядок n, равный $1, 2, 3, 4$ или 6.

Лемма 3.3. *Для произвольной точки $z \in \mathbb{R}^2$, пусть $x \in X$ – ближайшая к z точка множества Делоне (с радиусом покрытия R), n_x – порядок подгруппы вращений из локальной группы G_x, и x_1 – ближайшая к x точка из X. Тогда, если $n_x \geq 5$, то среди эквивалентных относительно группы C_{n_x} вершин правильного выпуклого n_x-угольника $x_1x_2 \ldots x_{n_x}$ ближайшая к z вершина находится от z ближе $2R$.*

Доказательство. Так как точка x является ближайшей к z, $|xz| \leq R$, то точка z расположена в области Вороного точки x в множестве X. Эта область содержится в правильном n_x-угольнике, образованном срединными перпендикулярами к отрезкам $[xx_1]$, $[xx_2]$, ... , $[xx_{n_x}]$. В свою очередь, при $n_x \geq 5$ этот n_x-угольник принадлежит правильному n_x-угольнику $x_1x_2 \ldots x_{n_x}$. Поэтому z также принадлежит этому n_x-угольнику $x_1x_2 \ldots x_{n_x}$. Значит, z принадлежит некоторому равнобедренному треугольнику с вершиной x, основанием которого является некоторая сторона n_x-угольника. Для определенности будем считать, что это равнобедренный Δxx_1x_2 (фиг. 6). Более того, если ближайшей к z вершиной n_x-угольника является x_1, то $z \in \Delta xpx_1$, где xp – срединный перпендикуляр к отрезку $[x_1x_2]$.

Фундаментальный треугольник Δxpx_1 вместе с точкой z принадлежит кругу $B_{x_1}(|x_1x|)$. Значит, $|zx_1| \leq |xx_1|$. С другой стороны, так как x_1 является ближайшей к x, то $|xx_1| < 2R$. Следовательно, $|zx_1| < 2R$. Лемма 3.3 доказана.

Доказательство (теоремы 2.1). Покажем, что расстояние от произвольной точки плоскости $z \in \mathbb{R}^2$ до ближайшей к z точки $\hat{x} \in X_{\rm cr} \subseteq X$ меньше $2R$, где R – радиус покрытия для X. Пусть



Фиг. 6. Иллюстрация к лемме 3.3.

$x \in X$ – ближайшая к z точка из X, тогда $|xz| \le R$. Если $x \in X_{\mathrm{cr}}$, т.е. $n_x \le 4$ или $n_x = 6$, то полагаем $\hat{x} = x$, и неравенство $|\hat{x}z| < 2R$ установлено.

Если $x \notin X_{\mathrm{cr}}$, то $n_x = 5$ или $n_x \ge 7$. Пусть $C_{n_x} (\subseteq G_x)$ – подгруппа локальных вращений вокруг x, пусть также $x_1 \in X$ – ближайшая к x точка из X. Орбита $C_{n_x} \cdot x_1$ точки $x_1 \in X$ образует правильный n_x-угольник. Так как $n_x = 5$ или $n_x \ge 7$, то в силу лемм 3.1 и 3.2 для каждой точки x' из орбиты $C_{n_x} \cdot x_1$ получаем $n_{x'} \le 3$, и потому каждая точка этой орбиты принадлежит X_{cr}.

С другой стороны, по лемме 3.3, если x' – ближайшая к z точка этой же орбиты, то $|zx'| < 2R$. Так как при этом $x' \in X_{\mathrm{cr}}$, то расстояние от z до ближайшей точки $\hat{x} \in X_{\mathrm{cr}}$ меньше $2R$. Следовательно, радиус покрытия R_{cr} для X_{cr} меньше $2R$.

Итак, показано, что для любого множества Делоне X на евклидовой плоскости подмножество X_{cr} всех точек из X, локальные группы которых кристаллографические, является множеством Делоне с радиусом покрытия $R_{\mathrm{cr}} < 2R$. Неулучшаемость этой оценки будет установлена в следующем разделе.

4. О НЕУЛУЧШАЕМОСТИ ОЦЕНКИ $R_{\mathrm{cr}} < 2R$

Покажем, что оценка $R_{\mathrm{cr}} < 2R$ неулучшаема в том смысле, что для любого достаточно малого числа $\varepsilon > 0$ найдется множество Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ с радиусом покрытия R, для которого подмножество Делоне X_{cr} всех кристаллографических точек имеет радиус покрытия R_{cr}, где $2R - \varepsilon < R_{\mathrm{cr}} < 2R$.

Построение множества X с радиусом покрытия R и $R_{\mathrm{cr}} > 2R - \varepsilon$. Возьмем квадратную решетку Λ, построенную на ортонормированном репере с началом $O(0, 0)$. Радиус R покрытия для Λ равен $R = \sqrt{2}/2$. Модифицируем решетку Λ следующим образом. Предварительно проведем две концентрические окружности с центром O радиусов $\sqrt{2}$ и $\sqrt{2}\cos(\pi/n)$ (штриховое обозначение на фиг. 7), где $n = 8k$, $k = 1, 2, \ldots$:

a) 8 соседних с O узлов решетки Λ (на фиг. 7 эти 8 узлов отмечены маленькими кружочками)

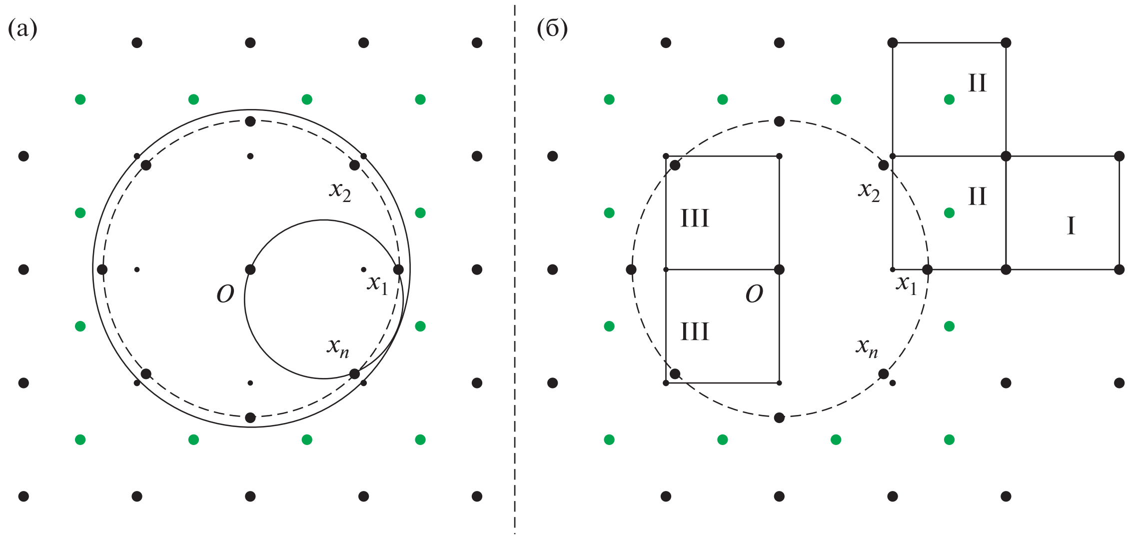
$$K = \{(\pm 1, 0), (0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1)\} \tag{4}$$

переместим на штриховую окружность в следующие точки

$$\left(\pm\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}, 0\right), \left(0, \pm\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\right), \left(\pm\cos\frac{\pi}{n}, \ \pm\cos\frac{\pi}{n}\right); \tag{5}$$

b) добавим вершины правильного выпуклого n-угольника, вписанного в (штриховую) окружность $\partial B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$ (фиг. 7 соответствует случаю $n = 8$, $k = 1$)

$$V_n = \left\{\left(\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\cos 2\pi\frac{m}{n}, \sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\sin 2\pi\frac{m}{n}\right), \quad m = 1, 2, \ldots, n\right\}, \tag{6}$$



Фиг. 7. Точность оценки $R_{cr} < 2R$: (а) – конструкция множества $X_{n_{cr}}$ с $R_{n_{cr}} > 2R - \varepsilon$; (б) – квадратные ячейки трех типов, проверка равенства $R_n = R$.

где $n = 8k$. Заметим, что среди n вершин V_n из (6) содержатся все 8 точек из (5): они соответствуют значениям индекса m, равным k, $2k$, $3k$, …, $8k$.

c) добавим к этому множеству множество M, состоящее из центров всех тех 12 квадратов решетки Λ, которые смежны с центральными 4 квадратами (на фиг. 7 эти точки отмечены зеленым цветом).

В результате получаем точечное множество X_n:

$$X_n := (\Lambda \backslash K) \cup V_n \cup M. \tag{7}$$

Для множества Делоне X_n выполняются следующие свойства:

1) радиус R_n покрытия для X_n равен $R = \sqrt{2}/2$ (такой же, как для решетки Λ);

2) в X_n имеется лишь одна точка с некристаллографической локальной группой, это – точка $O(0, 0)$; другими словами, подмножество $X_{n_{cr}}$ всех точек из X_n с локальными кристаллографическими группами есть

$$X_{n_{cr}} := X_n \backslash \{O\};$$

3) радиус покрытия $R_{n_{cr}}$ для $X_{n_{cr}}$ равен $R_{n_{cr}} = \sqrt{2}\cos(\pi/n)$; ясно, что $R_{n_{cr}} > \sqrt{2}/2$ при $n \geq 3$; следовательно, для любого $\varepsilon > 0$ при всех достаточно больших целых $n > N(\varepsilon)$ радиус $R_{n_{cr}}$ удовлетворяет неравенствам $\sqrt{2} - \varepsilon < R_{n_{cr}} < \sqrt{2}$, т.е. $2R - \varepsilon < R_{n_{cr}} < 2R$.

Проверим выполнение свойства 1): $R_n = R = \sqrt{2}/2$. Для этого достаточно установить, что расстояние $|zx|$ от произвольной точки z плоскости до ближайшего узла $x \in X_n$ не превышает $R = \sqrt{2}/2$, более того, $\sup_{z\in\mathbb{R}^2}\min_{x\in X_n}|zx| = \sqrt{2}/2$.

Внутри круга $B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$ содержится только одна точка $O(0, 0)$ из X_n. Далее, n-угольник $x_1x_2 \ldots x_n$ состоит из n конгруэнтных равнобедренных треугольников ΔOx_ix_{i+1} с общей вершиной O (фиг. 7а). Благодаря выбранному значению $\sqrt{2}\cos(\pi/n)$ радиуса штриховой окружности, окружность, описанная около ΔOx_ix_{i+1} имеет, радиус $\sqrt{2}/2$. Таким образом, эта окружность лежит внутри круга $B_O\left(\sqrt{2}\right)$, проходит через его центр O и касается его граничной окружности $\partial B_O\left(\sqrt{2}\right)$ (фиг. 7а). Поэтому окружность, описанная около ΔOx_ix_{i+1}, не содержит внутри точек из X_n. Следовательно, ΔOx_ix_{i+1} есть ячейка Делоне, и для любой точки z, лежащей в n-угольнике, расстояние до ближайшего узла из X_n не превышает $\sqrt{2}/2$.

Если точка z лежит вне n-угольника, то имеются три возможности (области I, II и III на фиг. 7б).

Для любой точки z из квадратной ячейки типа I решетки Λ со стороной 1 неравенство $\min_{x\in X_n}|zx| \le \sqrt{2}/2$ очевидно (фиг. 7б). Причем расстояние от центра квадратной ячейки типа I до вершины в точности равно $\sqrt{2}/2$. Поэтому для z из квадратной ячейки типа I имеем

$$\sup_{z\in I}\min_{x\in X_n}|zx| = \sqrt{2}/2.$$

Пусть теперь точка z принадлежит одной из 12 квадратных ячеек типа II решетки Λ, центры которых добавлены к X_n (зеленые точки на фиг. 7б). В этом случае расстояние от точки z до центра ячейки, который также принадлежит множеству X_n, не превосходит $\sqrt{2}/2$.

Пусть z принадлежит одной из 4 квадратных ячеек типа III (фиг. 7б). Если при этом z принадлежит многоугольнику $x_1x_2 \ldots x_n$, то неравенство $\min_{x\in X_n}|zx| \le 2R$ доказано выше. Если же z лежит в уголке квадратной ячейки типа III, не входящем в многоугольник, то расстояние $|zx|$ до ближайшей точки $x \in X_n$, очевидно, меньше $\sqrt{2}/2$.

Итак, доказано, что радиус покрытия R_n для X_n равен $R_n \equiv R = \sqrt{2}/2$.

Теперь проверим свойство 2): для любой точки из X_n, за исключением точки O, ее локальная группа кристаллографическая. Локальная группа точки O содержит подгруппу C_n, где $n \ge 8$, и поэтому не является кристаллографической.

Следовательно, в множестве $X_{n_{\rm cr}} = X_n \backslash \{O\}$ локальные группы для всех его точек кристаллографические. Наибольший пустой круг от точек из множества $X_{n_{\rm cr}}$ – это круг $B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$, описанный около правильного n-угольника. Поэтому для множества $(X_n)_{\rm cr}$ радиус покрытия $R_{n_{\rm cr}} = \sqrt{2}\cos(\pi/n)$, где $n = 8k$.

Таким образом, доказано свойство 3): для $\forall\varepsilon > 0$ найдется $N(\varepsilon)$, такое что для каждого $n > N(\varepsilon)$ существует множество Делоне X_n с радиусом покрытия R, в котором подмножество $X_{n_{\rm cr}}$ всех точек x с кристаллографическими локальными группами G_x является множеством Делоне с радиусом покрытия $R_{n_{\rm cr}}$, где

$$2R - \varepsilon < R_{n_{\rm cr}} < 2R.$$

Неулучшаемость оценки $R_{n_{\rm cr}} < 2R$ установлена.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подчеркнем, что теорема 2.1 есть двумерный аналог общей гипотезы (см. п. 1, а также [9]) о кристаллическом ядре $X_{\rm cr}$ множества Делоне в трехмерном пространстве.

Авторы благодарны И. Бабурину за проявленный интерес к полученным результатам. В частности, он обратил внимание на то, что для множества Делоне X, состоящего из вершин узора Пенроуза, в его кристаллическом ядре $X_{\rm cr}$ содержатся правильные декагоны, которые являются ячейками Делоне в этом ядре. Следовательно, группа декагона, содержащая поворот 10-го порядка, хотя и является локальной группой в множестве X, в то же время не является локальной группой в кристаллическом ядре потому, что не является группой никакого кластера в этом ядре. Действительно, неподвижная точка этой группы, центр ячейки Делоне, принадлежит X, но не принадлежит $X_{\rm cr}$.

Отметим, что этот факт не случаен. Из лемм 3.1 и 3.2 следует, что если в точке $x \in X$ локальная группа не кристаллографическая, то все ближайшие к x точки принадлежат кристаллическому ядру $X_{\rm cr}$ и поэтому являются вершинами ячейки Делоне в ядре, которая обладает этой же некристаллографической группой.

В связи с замечанием рецензента еще раз напомним, что локальная группа в точке x из X – это группа $2R$-кластера с центром в точке x.

Таким образом, возникает следующий вопрос. Пусть $X_{\rm cr}$ – кристаллическое ядро множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$. Рассмотрим последовательность вложенных, возможно не строго, множеств Делоне:

$$X \supseteq X_{\rm cr} \supseteq (X_{\rm cr})_{\rm cr} \supseteq ((X_{\rm cr})_{\rm cr})_{\rm cr} \supseteq \dots \tag{8}$$

Понятно, что если в этой последовательности на каком-то шаге встретится знак равенства двух множеств, то дальше последовательность множеств стабилизируется. Пока не известно, есть ли множество Делоне X, для которого последовательность строгих вложений бесконечна. Также неизвестен пример множества Делоне X, для которого последовательность (8) содержала бы более одного строгого вложения: $X \supset X_{\rm cr} \supset (X_{\rm cr})_{\rm cr}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Delaunay B.* Sur la sphere vide // Изв. АН СССР, ОМЕН. 1934. V. 6. P. 793–800.
2. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1937. Вып. 3. С. 16–62.
3. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1938. Вып. 4. С. 102–164.
4. *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.
5. *Штогрин М.И.* Об ограничении порядка оси паучка в локально правильной системе Делоне. Тез. докл. “Geometry, Topology, Algebra and Number Theory, Applications”, Inter. Conf. dedicated to the 120-th Anniversary of Boris Nikolaevich Delone (1890–1980) (Moscow, August 16–20, 2010), Abstracts, Steklov Math. Inst., Moscow, 2010. P. 168–169.
6. *Долбилин Н.П.* Множества Делоне в $\mathbb{R}^3$ с $2R$-условиями регулярности, Топология и физика, Сб. статей. К 80-летию со дня рождения ак. Сергея Петровича Новикова, Тр. МИАН, 302, М.: МАИК Наука/Интерпериодика, 2018. С. 176–201.
7. *Dolbilin N., Garber A., Leopold U., Schulte E., Senechal M.* On the Regularity Radius of Delone Sets in $\mathbb{R}^3$ // Discrete Comput. Geom. 2021. V. 66. P. 996–1024 (published online). https://doi.org/10.1007/s00454-021-00292-6
8. *Dolbilin N.P.* From local identity to global order. Materials for Lupanov Inter. Seminar XIII, Moscow State Univer., June 17–22, 2019. P. 13–22.
9. *Dolbilin N.P.* Local groups in Delone sets // Lect. Not. in Comput. Sci. and Engineer. by Springer Inter. Publ. 2021. V. 143. P. 3–11 (published online). https://doi.org/10.1007/978-3-030-76798-3
10. *Baburin I.A., Bouniaev M., Dolbilin N., Erokhovets N.Yu., Garber A., Krivovichev S.V., Schulte E.* On the origin of crystallinity: on a lower of Delone sets // Acta Crystallogr. Sect. A. 2010. № 6. P. 616–629.