Model zobecněného krystalu s nekrystalografickými symetriemi

Zuzana Masáková, APST 4. prosince 2007

- motivace u kvazikrystalů
- metoda řezu a projekce (‘ukroj a promítni’)
- model v rovině s pětičetnou symetrií
- nástin konstrukce modelu se symetrií vyššího řádu

Modely pevných látek

Pro hezký difrakční obraz nutné uspořádání atomů na dálku.

$\Longrightarrow$ u krystalů periodicita

Ale: 1982 objev materiálu s hezkým obrazem se symetriemi řádu 5, 2, 6

(symetrie icosahedronu)

Přitom: Icosahedronem nelze vyplnit prostor

Věta: Mřížka v $\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^3$ invariantní vůči rotaci řádu $k \quad \Longrightarrow \quad k \in \{2, 3, 4, 6\}$.

Jak získat model s pětičetnou symetrií?

Projekcí: V dimezi ≥ 4 už mřížka se symetrií řádu 5 existuje!

Vlastnosti požadované od $\boldsymbol{\Sigma} \subset \mathbb{R}^{\boldsymbol{d}}$

- delonovská vlastnost:

$$\exists\ r, R \ \text{ tak, že } \ 0 < r \leq R < +\infty \ \text{ a :}$$

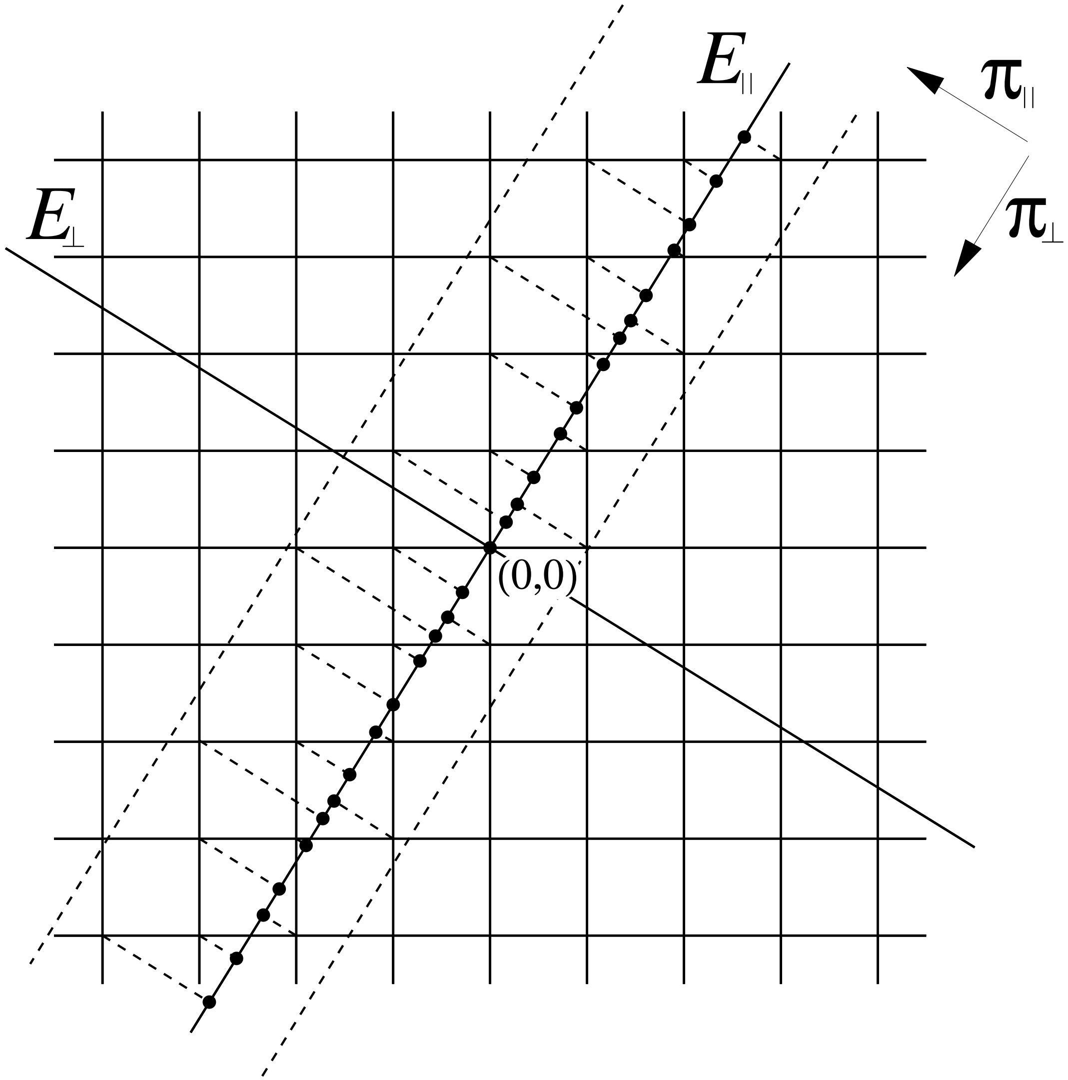
$$\begin{array}{lccl} \text{(i)} & \|x-y\| \geq r & & \text{pro } \ x, y \in \Sigma, \ \ x \neq y; \\ \text{(ii)} & B(x,R) \cap \Sigma & \neq \ \emptyset & \text{pro } \ x \in \mathbb{R}^d. \end{array}$$

- hezký difrakční obraz

- konečná lokální složitost

- atd.

Metoda ‘ukroj a promítni’



Metoda ‘ukroj a promítni’

$$
\begin{tikzcd}
 & H \subset \mathbb{R}^d \arrow[dl, "\Pi_1"'] \arrow[dr, "\Pi_2"] & \\
\Pi_1(H) \subset V_1 \arrow[rr, "\Pi_2 \circ \Pi_1^{-1}"'] & & \Pi_2(H) \subset V_2
\end{tikzcd}
$$

$$\mathbb{R}^d = V_1 \oplus V_2$$

$$H = \{\ \textstyle\sum_{i=1}^d a_i e_i \mid a_1, \ldots, a_d \in \mathbb{Z}\}$$

$$e_1, e_2, \ldots, e_d \text{ báze } \mathbb{R}^d$$

Projekce: Π_1 zúženo na H prosté; $\Pi_2(H)$ husté ve V_2.

$$\boxed{\Sigma(\Omega) = \{\ \Pi_1(x) \mid x \in H,\ \Pi_2(x) \in \Omega\}, \qquad \Omega \neq \emptyset \text{ omezená, otevřená}}$$

$\Sigma(\Omega)$ je aperiodická a splňuje požadované vlastnosti

Jak volit parametry, aby $\Sigma(\Omega)$ měla požadovanou symetrii?

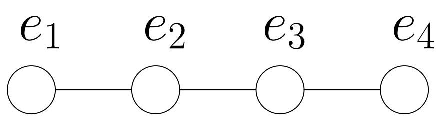
Mřížka $\boldsymbol{A_4} \subset \mathbb{R}^4$

dána vektory $\quad e_1, e_2, e_3, e_4 \quad$ s Gramovou maticí

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

tj. svírají úhel $\quad \angle(\alpha_i, \alpha_{i+1}) = \frac{2\pi}{3}$

Diagram:



Grupa W generována zrcadleními $\quad r_i = r_{e_i}, \quad$ kde $\quad \boxed{r_y(x) = x - \dfrac{x \cdot y}{y \cdot y}\, y}$

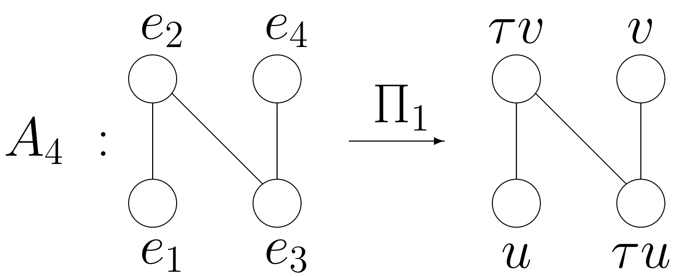
A_4 je invariantní vůči W, protože

$$\begin{aligned} r_i e_i &= -e_i \\ r_i e_{i\pm1} &= e_i + e_{i\pm1} \\ r_i e_j &= e_j \qquad \text{pro } |j-i| > 1 \end{aligned}$$

Zobrazení $\quad r_1 r_3 r_2 r_4 \quad$ je izometrie řádu 5.

Projekce do dimenze 2 a zlatý řez

V_1 dán bazickými vektory u a v



Volba skaláru τ vyplyne.

Definujme $\boxed{R_1 := \Pi_1(r_1 r_3)\Pi_1^{-1} \ \text{ a } \ R_2 := \Pi_1(r_2 r_4)\Pi_1^{-1}.}$

Pak

$$R_2(u) = \Pi_1(r_2 r_4)\Pi_1^{-1}(u) = \Pi_1 r_2 r_4(e_1) = \Pi_1(e_1 + e_2) = u + \tau v$$

$$R_2(\tau u) = \Pi_1(r_2 r_4)\Pi_1^{-1}(\tau u) = \Pi_1 r_2 r_4(e_3) = \Pi_1(e_2 + e_3 + e_4) = \tau v + v + \tau u$$

Z linearity R_2 plyne

$$\begin{aligned} R_2(\tau u) &= \tau R_2 u \\ (\tau+1)v + \tau u &= \tau u + \tau^2 v \end{aligned} \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\tau^2 = \tau + 1}$$

Ze dvou možností zvolíme $\quad \tau = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$.

$R_1 R_2$ je izometrie:

$$R_1R_2(u) = \Pi_1(r_1r_3r_2r_4)(e_1) = \Pi_1(e_2+e_3) = \tau u + \tau v$$
$$R_1R_2(v) = \Pi_1(r_1r_3r_2r_4)(e_4) = \Pi_1(-e_3-e_4) = -\tau u - v$$

Proto

$$\|\tau u + \tau v\| = \|u\|, \qquad \|\tau u + v\| = \|v\|\,.$$

Dostaneme

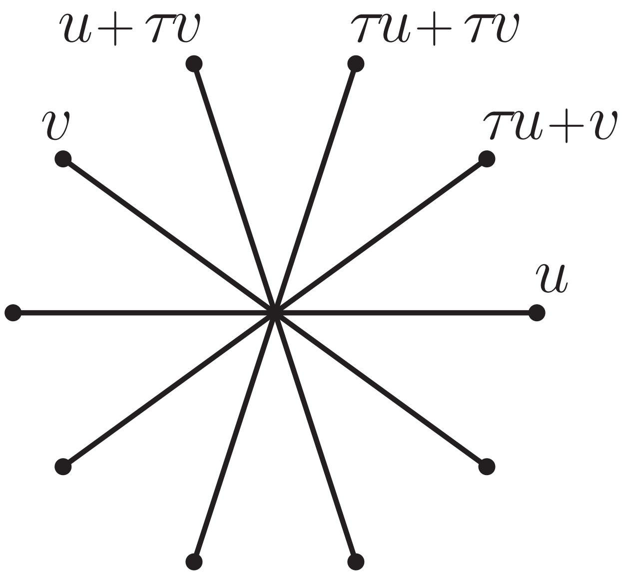
$$\|u\| = \|v\| \qquad \text{a} \qquad u\cdot v = -\frac{1}{2}\tau\ \|u\|^2 = \cos\frac{4\pi}{5}\ \|u\|^2\,.$$

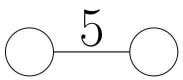
Vektory u a v jsou tedy stejné délky a svírají úhel $\frac{4}{5}\pi$.

Orbita vektorů $u, v \in V_1$

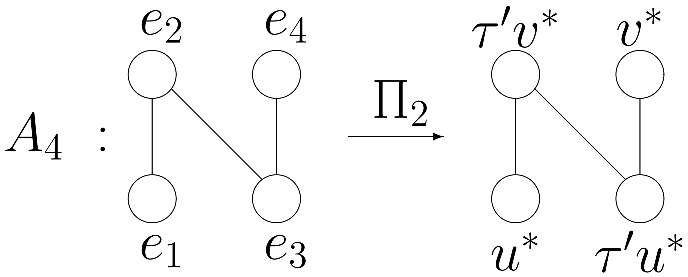
při působení grupy generované reflexemi R_1, R_2

a středovou symetrií $x \mapsto -x$



Dihedrální grupa $\mathcal{D}_{10}$: 

Druhý kořen $\tau' = \frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$ pro definici Π_2:



Opět u^* a v^* jsou stejné délky s úhlem $\frac{2}{5}\pi$. (Protože $\cos\dfrac{2\pi}{5} = -\dfrac{1}{2}\tau'$.)

Bod $\quad ae_1 + be_2 + ce_3 + de_4 \quad$ mřížky A_4 se zobrazuje:

$$\begin{aligned}\Pi_1(a,b,c,d) &= (a+\tau b)v + (c+\tau d)u \\ \Pi_2(a,b,c,d) &= (a+\tau' b)v^* + (c+\tau d')u^*\end{aligned}$$

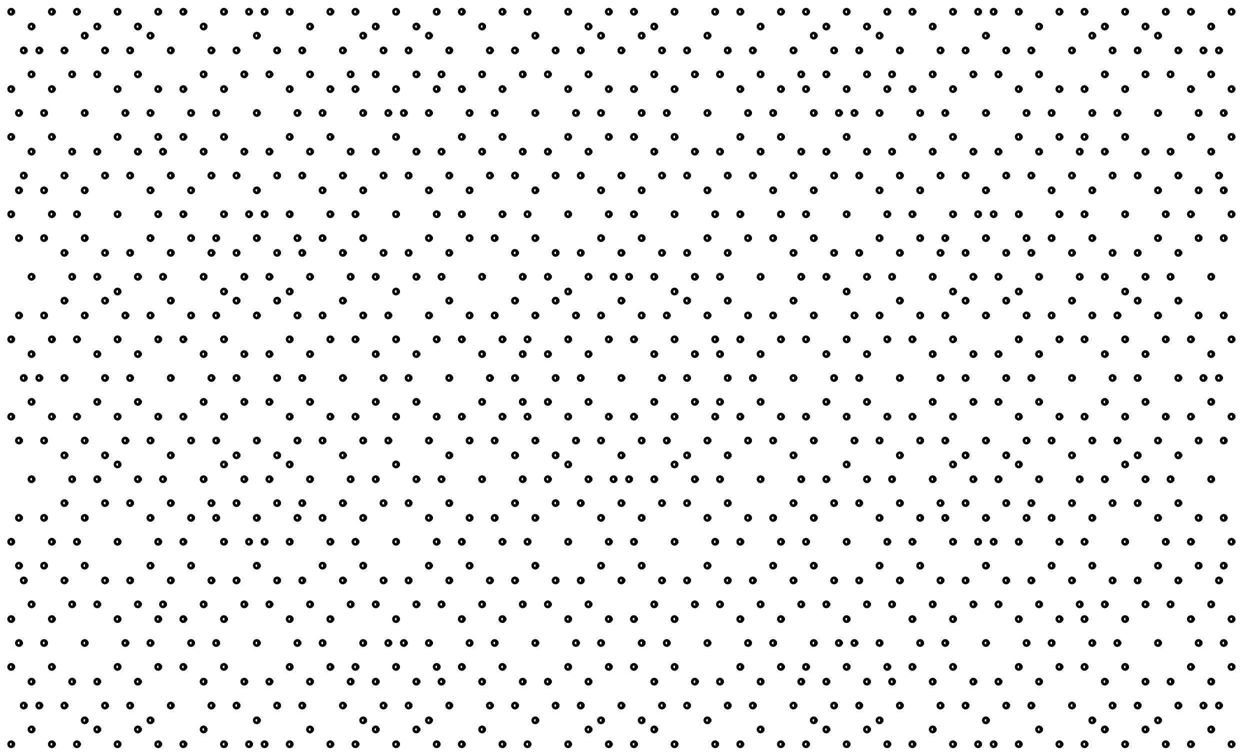
A máme

$$\Sigma(\Omega) = \{(a+\tau b)v + (c+\tau d)u \mid a,b,c,d \in \mathbb{Z},\ (a+\tau' b)v^* + (c+\tau d')u^* \in \Omega\}.$$

Jak volit Ω?

Věta: $\Sigma(\Omega)$ má desetičetnou symetrii $\iff$ Ω má desetičetnou symetrii.

Např. Ω kruh se středem v počátku:



Obecněji

Rotace o úhel $\frac{2\pi}{k}$ pro $k \in \mathbb{N}$ vyžaduje iracionalitu danou $\cos\frac{2\pi}{k}$.

Experimentálně pozorované:

$$8\text{-, } 10\text{- a } 12\text{-ti četné symetrie} \quad \Longrightarrow \quad \cos\frac{2\pi}{k} \text{ kvadratické číslo.}$$

Ostatní nekrystalografické symetrie $\Longrightarrow$

$\Longrightarrow$ iracionalita vyššího řádu (např. $k = 7$ kubické číslo.)

Pomocí mřížek A_{2n} lze dostat symetrie řádu $2n+1$.