

## МАТРИЧНЫЕ МОДЕЛИ ОБОБЩЕННОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

**Н. А. Балонин<sup>а</sup>**, доктор техн. наук, профессор

**М. Б. Сергеев<sup>а</sup>**, доктор техн. наук, профессор

**В. С. Суздаль<sup>б</sup>**, доктор техн. наук, профессор

<sup>а</sup>Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, РФ

<sup>б</sup>Харьковский институт сцинтилляционных материалов НАН Украины, Харьков, Украина

**Цель:** формирование общих подходов к получению матричных моделей обобщенной кристаллографии. **Результаты:** подтверждена гипотеза о том, что каждому квазикристаллу отвечает ассоциированная с ним квазиортогональная матрица. Квазикристаллу Д. Шехтмана соответствует матрица золотого сечения. Сделан вывод, что для упорядоченных структур, состоящих из двух бесконечно повторяющихся фрагментов, моделью, отражающей детали строения, может являться модульно двухуровневая матрица золотого сечения. **Практическая значимость:** определены перспективы дальнейших исследований: и материалы, и матрицы в состоянии иметь еще и другие виды, причем матрицы могут привлекаться для предсказания существования и затем — для анализа материалов. Разработано соответствующее программное обеспечение для математической сети Интернет.

**Ключевые слова** — кристаллические структуры, квазикристаллы, ортогональные матрицы, золотое сечение, матрица золотого сечения, матрицы Белевича, матрицы Мерсенна, динамические системы, странный аттрактор.

## Введение

Наука соткана из открытий, и особое значение в ней имеют те, которые затрагивают основы устоявшихся представлений. Так, математическое сообщество Древней Греции было потрясено открытием несоизмеримых величин, которое пришло в противоречие с пифагорейской теорией целых чисел. Учение о целочисленной основе всего сущего перестало быть истинным. Осенью 1772 года эксперименты А. Лавуазье по сжиганию фосфора и серы в герметически запаянных сосудах привели к ниспровержению господствовавшей тогда теории флогистона и к замене ее кислородной теорией горения и прокаливания. С этого момента, в рамках «химической революции», началось формирование новых представлений об агрегатных состояниях вещества. Закон сохранения массы обрел химический смысл закона сохранения элементов.

В число выдающихся научных открытий следует включить и результаты работы израильского физика Д. Шехтмана из Национального бюро стандартов США, сообщившего в декабре 1984 года о получении кристаллоподобного сплава  $Al_{86}Mn_{14}$  с необычными свойствами и удостоенного за свои работы Нобелевской премии 2011 года [1]. С этого момента стало бурно развиваться новое направление физики конденсированного состояния — область квазикристаллографических структур, принципиально отличающаяся от области не только кристаллов, но и аморфных тел и жидкостей.

Это направление мы намерены рассмотреть в статье подробнее с указанием математических моделей квазикристаллов.

## Симметрии кристаллов

Согласно традиционным представлениям, структура твердого вещества, находящегося в кристаллическом состоянии, характеризуется двумя важнейшими особенностями — упорядоченностью и периодичностью. В кристаллах естественные плоские грани и ровные ребра отражают их внутреннюю структуру, являются внешним выражением упорядоченного расположения ионов, атомов, молекул или их групп, входящих в химическую формулу кристалла. Эти упорядоченные структурные частицы, расположенные правильными рядами в строгой иерархической последовательности, определяют пространственную кристаллическую решетку. Для строгого описания кристаллической решетки, которая, вообще говоря, представляет собой математическую абстракцию, выработана особая терминология. Среди ее терминов самым фундаментальным понятием является симметрия.

Знаменитый минералог и математик Евграф Степанович Федоров произвел строгий вывод всех возможных пространственных групп, тем самым описал симметрии всего разнообразия кристаллических структур. В 1918 году немецкий математик Нетер доказала теорему, согласно которой каждой непрерывной симметрии физической системы соответствует некоторый закон сохранения, включая закон сохранения энергии.

Известны две специфические операции симметрии — трансляционная (переносная) и поворотная (вращательная). Трансляционная симметрия — повторяемость объекта в пространстве через определенное расстояние вдоль прямой,

называемой осью трансляции. Кристаллическая решетка строится путем периодической трансляции частиц вдоль осей переноса (координатных осей). При трансляционном перемещении частицы вдоль трех осей переноса образуется трехмерная решетка. В общем случае векторы трансляции образуют между собой неперпендикулярные и неравные углы. Периоды трансляции по разным направлениям также могут отличаться друг от друга.

Поворотная симметрия — свойство кристалла совмещаться с самим собой при вращении на некоторый определенный угол вокруг оси симметрии.

Трансляционная и поворотная симметрии не всегда уживаются одна с другой. При наличии трансляционной симметрии возможны только оси симметрии, отвечающие поворотам на 180, 120, 90 и 60°. Эти оси обозначают символами 2, 3, 4 и 6. Строго математически доказано, что отмеченные порядки осей в том или ином сочетании для кристаллов единственно возможны. Других порядков осей симметрии, поворот вокруг которых переводил бы решетку кристалла саму в себя, в классической кристаллографии не существует.

### Дальний порядок в квазикристаллах

Трансляционная и поворотная симметрии порождают, в свою очередь, важное понятие дальнего порядка, который бывает двух типов — дальний трансляционный порядок и дальний ориентационный порядок.

Полученный Д. Шехтманом металлический сплав  $Al_{86}Mn_{14}$  создавался быстрым охлаждением расплава. Электронограмма полученного образца показывала резкие регулярные максимумы, обладавшие поворотной симметрией 5-го порядка. Обнаруженная структура казалась парадоксальной. Наличие резких дифракционных максимумов свидетельствовало об упорядоченном расположении атомов в структуре, характерной для кристаллов, а наличие наблюдавшейся оси симметрии 5-го порядка противоречило фундаментальным представлениям классической кристаллографии и говорило о том, что исследуемое вещество не кристалл.

Квазикристаллы, открытые Шехтманом, упорядочены, но не периодичны, т. е. у них отсутствует трансляционная симметрия. В квазикристаллах очень причудливое заполнение пространства, на самом деле там два или три типа элементарных ячеек, которые причудливым образом друг с другом комбинируются, не производя трансляционной периодичности. Тем не менее структура обладает дальним порядком. Дифракционная картина, т. е. рассеяние рентгеновского луча структурой квазикристалла, будет

состоять из четких, острых, строго определенно расположенных пятен. Точно так же, как в случае кристалла. К настоящему времени обнаружено и синтезировано множество аналогичных структур, состоящих, как правило, из атомов металлов и (иногда) кремния. Каждый год появляются сообщения и о новых по составу квазикристаллах, и о новых вариантах структур, существование которых ранее нельзя было даже предположить. В большинстве синтезированных квазикристаллов обнаружены оси симметрии 5-, 7-, 8-, 10-, 12-го и еще более высоких порядков, запрещенные для идеальных кристаллов.

Итак, открыто новое состояние вещества, обладающее дальним порядком, а также элементами симметрии, запрещенными для кристаллов. Это состояние было названо квазикристаллическим, и оно найдено для нескольких сот веществ, и во всех случаях это металлические сплавы, а также коллоидные системы. Вы никогда не увидите квазикристаллы из известных ныне, скажем, в ионном веществе типа хлорида натрия. В оксидах, сульфидах, сульфатах и так далее нет таких квазикристаллов. Это всегда металлические сплавы, очень часто на основе алюминия. Еще одна особенность квазикристаллов: их химические формулы крайне странные. Например,  $Al_{86}Mn_{14}$ , т. е. это не  $AlMn$ , не  $AlMn_2$ , а очень странные, диковинные пропорции химических элементов.

Как понять существование, как описать структуру такого рода веществ? В книге физика-теоретика из Оксфордского университета Р. Пенроуза «Новый ум короля» говорится, что процесс роста квазикристаллов обусловлен нелокальным механизмом, когда наращиваются сразу целые группы частиц, которые как бы заранее договариваются подойти к поверхности в нужный момент времени. «Наличие такого свойства, — пишет автор, — одна из причин серьезных разногласий, возникающих сегодня в связи с вопросом о квазикристаллических структурах и их выращивании, так что было бы неразумно пытаться делать окончательные выводы до тех пор, пока не будут разрешены некоторые основополагающие вопросы» [3].

### Математические подходы к описанию квазикристаллов

Сегодня понятно, что описать структуру квазикристаллов можно двумя разными способами. Первый — это мозаики Пенроуза, которые являются классическим примером двумерного квазикристалла [4], второй — это многомерное описание [5].

Предварительно рассмотрим одномерную идеализированную модель. Пусть в равновесном

состоянии частицы квазикристалла расположены вдоль оси переноса  $z$  и образуют линейную цепочку с переменным периодом, изменяющимся по закону геометрической прогрессии:

$$a_n = a_1 D^{n-1},$$

где  $a_1$  — начальный период между частицами;  $n$  — порядковый номер периода,  $n=1, 2, \dots$ ;  $D = (1 + \sqrt{5})/2 = 1,6180339\dots$  — иррациональное число золотой пропорции.

Построенная цепочка частиц служит примером одномерного квазикристалла с дальним порядком симметрии. Структура абсолютно упорядочена, наблюдается систематичность в расположении частиц на оси — их координаты определяются одним законом. Вместе с тем нет повторяемости — периоды между частицами различны и все время возрастают. Поэтому полученная одномерная структура не обладает трансляционной симметрией, и вызвано это не хаотическим расположением частиц (как в аморфных структурах), а иррациональным отношением двух соседних периодов.

Логическим продолжением рассмотренной выше одномерной структуры квазикристалла служит двумерная структура, которую можно описать методом построения непериодических мозаик (узоров), состоящих из двух различных элементов, двух элементарных ячеек — утолщенного и утонченного ромбов строго определенных пропорций, да не просто пропорций, а пропорций «золотого сечения» или  $1,618\dots$ . Такую мозаику разработал в 1974 году Пенроуз [2]. На основе его мозаики с двумя «элементарными ячейками», соединенными друг с другом по определенным правилам стыковки, может быть создана модель квазикристалла. Эти специальные правила намного сложнее, чем примитивное транслирование одинаковых ячеек в классических кристаллах. Модель Пенроуза хорошо описывает некоторые основные свойства квазикристаллов, но недостаточно объясняет реальные процессы их атомного роста, носящие явно нелокальный характер. Например, трудно понять, как мозаика может отражать устойчивость процесса получения квазикристалла.

Многомерный подход (higher-dimensional approach) базируется на информации о распределении интенсивности в обратном пространстве, т. е. он применим непосредственно для описания экспериментальных дифракционных данных. Он основан на том, что с математической точки зрения построение аперидической функции может быть сведено к сумме гармонических функций с числом линейно независимых волновых векторов, большим, чем размерность реального пространства. Квазипериодические функции в  $s$ -мерном пространстве можно рассматривать

как иррациональные сечения  $n$ -мерных периодических функций ( $n > s$ ), где  $n$  определяет минимальную размерность пространства вложения, а  $s$  — размерность собственно квазикристалла.

Структурный фактор квазикристалла в многомерном подходе рассчитывается на основе распределения гиператомов в элементарной ячейке  $n$ -мерной решетки. Метод позволил провести классификацию возможных точечных групп симметрии аксиальных квазикристаллов, установить размерность пространства вложения и соответствующие  $n$ -мерные пространственные группы для каждого случая [6, 7].

Неожиданное появление золотой пропорции в структуре квазикристаллов говорит о присутствии в их симметрии живого «мотива», так как в отличие от искусственных кристаллов только живой мир допускает замечательные соотношения золотой пропорции. Запрещенные в кристаллографии симметрии 5-го, 7-го и других порядков являются самыми распространенными в живой природе. Поворотная симметрия 5-го порядка (угол  $72^\circ$ ) наиболее эффективно представлена в мире растений и в простейших живых организмах, в частности в отдельных разновидностях вирусов и организмах некоторых обитателей морей (морских звезд, морских ежей, колоний зеленых водорослей, радиолярий и др.). Цветки многих растений обладают поворотной симметрией 5-го порядка, которая до последнего времени не наблюдалась в неживой природе. Чешуйки у еловой шишки, зерна у подсолнуха или ячейки у ананаса также образуют некоторое квазирегулярное покрытие поверхности, в котором соседние ячейки организуются в хорошо различимые спирали.

Как видим, поворотная симметрия 5-го порядка, играющая важную роль в квазикристаллах, наиболее ярко проявляется как бы в переходной области между статично неживым и гибким живым миром природы. И вот здесь-то напрашивается мысль о том, что внутреннее строение квазикристаллов служит своеобразным началом движения от застывших кристаллических форм к подвижным живым структурам. Другими словами, квазикристаллы можно рассматривать как переходную форму от устойчивых и предсказуемых трансляционных конструкций, несущих малый объем информации, к подвижности, к свободному движению, к более информационно насыщенным структурам.

Как отмечает Д. Гратиа в статье «Квазикристаллы», понятие квазикристалла представляет фундаментальный интерес, потому что оно обобщает и завершает определение кристалла. Теория, основанная на этом понятии, заменяет извечную идею о «структурной единице, повторяемой в пространстве строго периодическим образом» ключевым понятием дальнего поряд-

ка. Это понятие привело к расширению кристаллографии, вновь открытые богатства которой мы только начинаем изучать. Его значение в мире минералов можно поставить в один ряд с добавлением понятия иррациональных чисел к рациональным в математике [8]. Таким образом, сегодня в кристаллографии активно формируется непротиворечивый переход от кристаллических структур, описываемых традиционной кристаллографией, к квазикристаллическим, подчиняющимся определенным математическим законам в рамках своеобразной обобщенной кристаллографии. В обобщенном определении кристалла вместо элементарной ячейки, повторяющейся в пространстве строго периодически образом, ключевым понятием становится дальний порядок. Локальная структура определяется уже не только ближайшими соседями, но и более удаленными частицами. Исходя из вышесказанного следует отметить, что в рамках формирующейся обобщенной кристаллографии интересные результаты могут дать информационно-емкие матричные модели.

### Матричные модели

Предварительно приведем ряд определений из области матричного исчисления.

**Определение 1.** Значения, которым равны элементы матрицы, будем называть ее уровнями. Так, матрица Адамара с элементами  $\{1, -1\}$  имеет два уровня (двухуровневая), а матрица Белевича с элементами  $\{0, 1, -1\}$  — трехуровневая.

**Определение 2.** Будем называть квазиортогональной квадратную матрицу  $A$  порядка  $n$  с приведенными к единице максимумом абсолютных значений ее элементов, удовлетворяющую квадратичному условию связи

$$A^T A = \omega I,$$

где  $I$  — единичная матрица;  $\omega$  — вес матрицы.

Вообще говоря, квазиортогональными в широком смысле этого слова можно было бы назвать любые ортогональные по столбцам (и строкам) матрицы. В таком случае они включили бы в себя ортогональные матрицы с весом  $\omega=1$  и максимальным по модулю элементом  $m < 1$ . Однако в данном случае нас интересуют матрицы, экстремальные по детерминанту при ограничении на значения ее элементов, — они должны быть не большими 1. Очевидно, что элементарным умножением на  $1/m$  любая ортогональная матрица с детерминантом, равным 1, сводится к квазиортогональной, причем ее детерминант увеличивается в  $1/m^n$  раз.

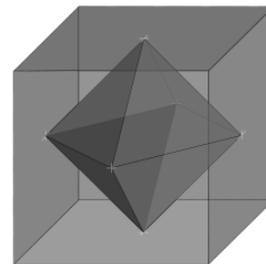
Дальнейшее увеличение детерминанта масштабированием невозможно, поскольку это сделает элементы матрицы большими 1. Из  $\det(A)^2 = \omega^n$  и  $|\det(A)| = 1/m^n$  следует, что  $\omega = 1/m^2$ .

Геометрическая интерпретация детерминанта матрицы связана с объемом тела, построенного на вектор-столбцах матрицы. Отсюда лежит прямой путь к формулировкам задач о плотной упаковке. Например, в трехмерном случае три ортогональных между собой единичных по длине вектор-столбца ортогональной матрицы представляют собой оси, ведущие к вершинам октаэдра (они задают его положение). Допустим теперь, что октаэдр находится в кубе с координатами вершин, равными 1 или  $-1$ .

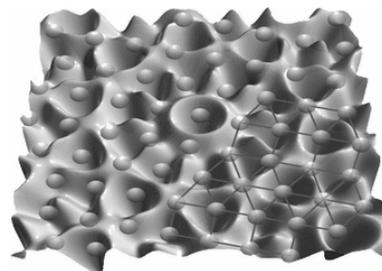
Очевидно, что показанное на рис. 1 положение октаэдра не оптимально с точки зрения его объема. Наклоняя октаэдр, мы лишаем его соприкосновения со стенками ограничения и, соответственно, можем увеличить его объем масштабированием. Вопрос заключается в том, каково оптимальное положение увеличиваемого октаэдра, при котором его объем невозможно увеличить уже никакими поворотами? Эта чисто геометрическая задача эквивалентна также поиску оптимального положения противотанкового ежа, для которого возможно построить минимальный сарай. То есть одна и та же геометрическая фигура может занимать больший или меньший объем — все зависит от ее положения.

Теперь вспомним, что объем октаэдра равен детерминанту квазиортогональной матрицы. Отсюда следует вывод, что экстремальные квазиортогональные матрицы описывают точные решения задач о плотной упаковке.

К задачам о плотной упаковке относятся также физические задачи размещения микрочастиц в ячейках силового поля (рис. 2). Примером



■ Рис. 1. Октаэдр в кубе



■ Рис. 2. Микрочастицы в ячейках поля

являются положения намагниченных стрелок в магнитном поле. Стрелки стремятся занимать не любое, а некоторое компактное с точки зрения ориентации их вдоль силовых линий положение.

Геометрические, физические и абстрактные математические модели типа октаэдра в стесненном пространстве могут иметь между собой весьма мало общего. Однако вспомним, что таблица химических элементов Менделеева построена по принципу, которому подчиняются и квазиортогональные матрицы. В частности, хорошо известный период таблицы соотносится с кратностью четырем порядкам матриц Адамара — квазиортогональных матриц с элементами 1 и  $-1$ .

С ростом порядка  $n$  экстремальные матрицы ведут себя достаточно экзотично. В частности, если порядок матрицы не кратен четырем, то значений 1 и  $-1$  достигает только часть элементов. Остальные элементы не равны столь большим по амплитуде значениям, но они равны между собой. Иными словами, экстремальные квазиортогональные матрицы — малоуровневые.

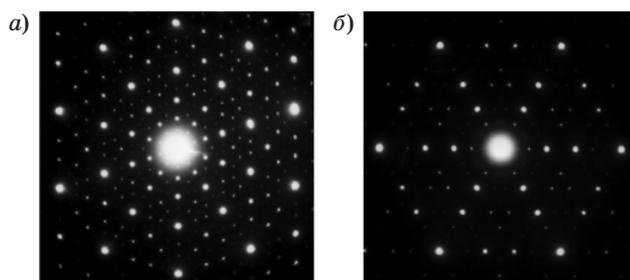
Максимальный элемент  $m$  связанной с ними ортогональной матрицы, той матрицы, из которой они получаются масштабированием, называется их  $m$ -нормой. Параметр  $m$ -норма экстремальных решений минимален. В самом деле,  $|\det(\mathbf{A})|=1/m^n$ , чем меньше значение  $m$ , тем выше детерминант. Следовательно, им соответствуют минимаксные матрицы — ортогональные матрицы заданного порядка с минимальным максимальным по модулю элементом.

В 2013 году авторы статьи выдвинули гипотезу: каждому квазикристаллу отвечает ассоциированная с ним квазиортогональная матрица, квазикристаллу Д. Шехтмана отвечает матрица золотого сечения [9]. Какие есть на то основания?

С ростом нечетного порядка  $n$  число уровней матриц линейно растет, напоминая бифуркацию (расщепление уровней) в хаотических задачах. Есть и критический порядок — 13, на котором число уровней растет уже взрывным образом. Казалось бы, на этом особенно экстремальных задач заканчиваются. Но тут мы подходим к центральной точке нашего исследования. Как известно, экстремумы бывают двух типов — глобальные (абсолютные) и локальные (относительные).

Оказывается, что матрицы локального максимума детерминанта — не с самым большим значением детерминанта, но все же экстремальным — остаются малоуровневыми. Более того, часто такие матрицы являются двухуровневыми матрицами со значениями элементов 1 и  $-b$  [10].

Почему это так важно? Потому, что неперIODическая мозаика Пенроуза как модель квазикристалла Шехтмана — двумерная модель. Между тем физическая задача — это задача трехмерная. На рис. 3, *a* приведена дифракция от квазикри-



■ Рис. 3. Дифракции квазикристалла Шехтмана (*a*) и обычного кристалла (*b*)

сталла вдоль оси симметрии 5-го порядка, а на рис. 3, *b* — привычная дифракция от кристалла с разрешенной симметрией 6-го порядка.

Теперь представим себе, что существует квазиортогональная матрица порядка 10 с элементами 1 и  $-b$ ,  $b=0,618\dots$  — одно из чисел золотого сечения. Во-первых, такого типа матрицы ранее никогда не сопоставляли с квазикристаллами, во-вторых, едва ли значение ее уровня случайно.

Перед нами новая десятимерная абстрактная математическая модель квазикристалла Шехтмана, и, что важно подчеркнуть, модель не статическая, как модель Пенроуза. Матрицы локального максимума детерминанта — естественный продукт рекурсивных оптимизационных процедур, точно так же, как квазикристалл — продукт «итераций» сходного, но физического характера. Кроме тождества (в некоторых, разумеется, чертах) результирующих объектов существует и тождество в поведении приводящих к результату процедур.

Квазикристаллы — продукт весьма экстремальных условий, их получают сверхбыстрым охлаждением. Квазиортогональная матрица золотого сечения с уровнями 1 и 0,618... тоже продукт специфичного процесса. На порядке 10 глобальный максимум детерминанта среди квазиортогональных матриц наблюдается у  $S$ -матрицы — матрицы с элементами 1,  $-1$  и нулем на диагонали. Ни к какому золотому сечению эта матрица не причастна, и итерационная процедура, изображенная на рис. 4, ведет именно к ней. Любая неортогональная матрица  $M$  (неортогональность помечается чертой сверху) ортогонализуется, например, алгоритмом Грамма — Шмидта [9].



■ Рис. 4. Процедура поиска матрицы

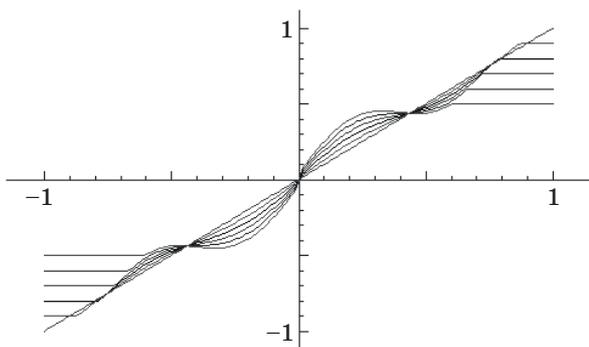
Далее, поскольку мы заинтересованы в росте детерминанта матрицы, а он обратно пропорционален степени от величины максимального элемента, матрица насыщается (обычная нелинейная операция). Этот циклически повторяющийся процесс ведет к экстремуму детерминанта квазиортогональной матрицы.

Для того чтобы экстремум был не глобальным, а локальным, необходимо изменить функцию насыщения, например, сильно увеличивать малые элементы (рис. 5). Сказать, что этим именно моделируется разогрев вещества, нельзя, но избежать матрицы с нулевыми элементами этим мы можем. При желании можно ввести и гистерезисные зависимости.

Таким образом, от статической модели мы пришли к динамической модели, той, которую изучает теория динамических систем. Матрица на выходе этой системы — аттрактор, это то состояние, которое получается по завершении динамического процесса. Параметр, ведущий к бифуркациям, т. е. к увеличению числа уровней, довольно специфичен. Это порядок матрицы. В целом это квадратичная задача, поскольку речь идет об оптимизации детерминанта на квадратичном уравнении связи.

Низ функции насыщения (область в окрестности нуля) образует в процессе поиска матрицы своеобразные «числовые фонтаны», восходящие в матрице вверх потоки чисел. Чем интенсивнее настроен этот процесс, тем больше шансов получить модель того физического явления, которое Шехтман получил быстрым замораживанием. И имеется возможность «выключить» (заморозить) на любой стадии рассматриваемую модель.

Модель Пенроуза двумерна, статична и к настоящему моменту хорошо изучена. Совсем иное дело — квазиортогональные матрицы и порождающие их динамические процессы. Это модели новые, и мы призываем их внимательно изучать, поскольку открытия могут быть сделаны на междисциплинарном стыке (потребовалась же для понимания физического результата Д. Шехтмана модель Пенроуза).



■ Рис. 5. Различные функции насыщения

### Прогнозирующие модели квазикристаллов

Очевидно, что помимо корня из 5, ведущего к золотому сечению, в этих задачах, связанных с матрицами различных порядков, можно встретить любые иррациональности, построенные на корнях из простых чисел 2, 3, 5, 7 и т. п. Квазикристалл Шехтмана выделен принадлежностью к классу задач, в которых встречается золотое сечение. Другие квазикристаллы вполне могут быть ассоциированы с другими квазиортогональными матрицами. Являются ли динамические процессы, порождающие квазиортогональные матрицы, предсказуемыми? Возможно. Нашлась же матрица с уровнем 0,618... .

Число  $\tau$  (золотое сечение) является представителем специального класса иррациональных чисел, называемых алгебраическими целыми. Последние определяются как корни алгебраического уравнения

$$x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0 = 0,$$

где все  $a_n$  — целые числа.

Число  $\tau$  определяется как решение простейшего квадратного уравнения  $\tau^2 = \tau + 1$ , которое является уравнением самоподобия. Записав его в виде  $1 = 1/\tau + 1/\tau^2$ , видим, что оно определяет разбиение отрезка единичной длины на два отрезка с длинами  $1/\tau$  и  $1/\tau^2$ , пропорциональное отношение которых и есть  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 = 1,618\dots$ ,  $1/\tau = 0,618\dots$ . Что касается самоподобия, то это своеобразная характеристика симметрии системы относительно однородного растяжения размеров системы — масштабная инвариантность или скейлинг. Самоподобие квазикристаллов, как и кристаллов, состоит в том, что есть такие точки в пространстве, относительно которых при увеличении растяжения до любой другой точки решетки в  $q$  раз попадаешь опять в точку решетки. Квазикристаллы с симметрией 5-го и 10-го порядков самоподобны относительно растяжения в  $\tau$  раз, т. е. икосаэдрическому квазикристаллу отвечает матрица золотого сечения. Предположительно у квазикристаллов с симметрией 8-го и 12-го порядков коэффициентами растяжения самоподобия являются числа  $\xi = (1 + \sqrt{2})/2 = 1,207$  и  $\psi = (2 + \sqrt{3})/2 = 1,866$  соответственно [11].

Числа  $\tau$ ,  $\xi$ ,  $\psi$  — иррациональные. Матрицы с иррациональными уровнями — сравнительно новый объект [12]. Для их нахождения используется алгоритм «утряски» детерминанта, описанный нами выше. Помимо матриц 5-го и 10-го порядков с золотым сечением, есть и другие матрицы небольших порядков (например, матрица Пифагора) с другими иррациональными числами-уровнями, возможно, отвечающими свойствам существующей линейки квазикристаллов.

Матрица золотого сечения  $G_{10}$  — модульно-двухуровневая матрица с модулями уровней  $a=1$  и  $g=0,618\dots$ , она представлена на рис. 6, а и б. Яркость клетки отражает величину уровня ее элемента в пределах от 0 (белый цвет) до -1 (красный цвет). Как видно, уровни дискретны.

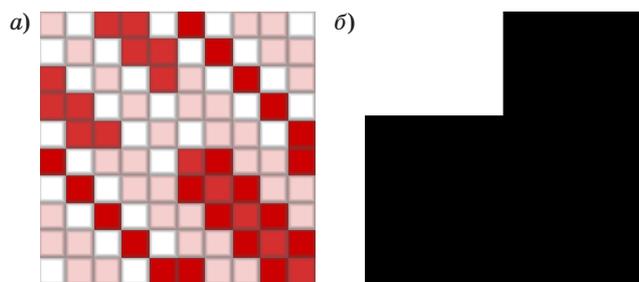
Вид матрицы золотого сечения зависит от сортировки строк и столбцов, существует бициклическая форма, показанная на рисунке. Циклические и бициклические формы сопоставимы с моделями, в которых просматривается дальняя упорядоченность, как это имеет место быть с линиями магнитного поля, чьими отдаленными моделями циклические матрицы являются (сочетание хаоса в знаках элементов вдоль строк и жесткой упорядоченности вдоль «диагоналей»). Ветвь матриц золотого сечения определена на порядках  $n=10 \times 2^k$ . Для них справедлива следующая логика построения (сходная с логикой построения матриц Адамара): матрица  $G_{10}$  является стартовой для всей последовательности матриц, находимой итерациями, представимыми

ми в виде  $G_{nk} = \begin{bmatrix} G_{nk} & G_{nk} \\ G_{nk} & -G_{nk} \end{bmatrix}$ . Значение функции

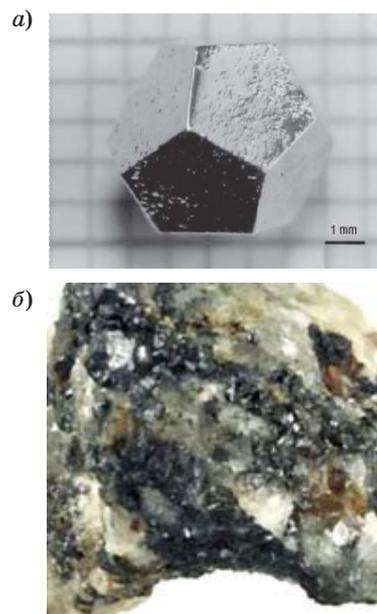
уровня матриц этой ветви — константа  $g=1/\tau$ . Область приложения математических моделей в виде компактных в точном математическом смысле базисов велика [13].

С 1984 года в лабораториях было получено более 100 различных квазикристаллов, и считалось, что в природе образование таких веществ невозможно из-за крайне нестабильной их структуры. Природный образец на основе  $Al_{63}Cu_{24}Fe_{13}$  был найден российским геологом Валерием Крячко на Корякском нагорье; в музее, куда он попал из окрестностей Анадыря, где встречается хатырkit, его обнаружил Стейнхардт.

Хатырkit — природный немагнитный металлический минерал, содержащий примерно 25 % меди, 25 % цинка и 50 % алюминия. В образце были обнаружены совсем крохотные — около 100 мкм в диаметре — включения другого минерала. Его состав: 63 % алюминия, 24 % меди



■ Рис. 6. Матрица золотого сечения  $G_{10}$  (а) и гистограмма модулей элементов с уровнем  $g=1,618\dots$  (б)



■ Рис. 7. Но-Mg-Zn квазикристалл (а) и хатырkit (б)

и 13 % железа — оказался очень близок к одному из наиболее известных и хорошо изученных квазикристаллов, открытых в 1987 году японской группой под руководством Ань Пан Цай (рис. 7, а и б).

Полученная в экспериментах [10] квазиортогональная матрица 5-го порядка имеет максимальный на классе квазиортогональных матриц детерминант, уровни гистограммы модулей ее элементов соотносимы друг с другом как 6:3:2 (напоминает состав включения в хатырkit  $Al_{63}Cu_{24}Fe_{13}$ ). Порядок 5 здесь играет, очевидно, большую роль.

### Заключение

Для упорядоченных структур, состоящих из двух бесконечно повторяющихся фрагментов, моделью, отражающей детали строения, может являться модульно двухуровневая матрица золотого сечения. Здесь просматриваются одни и те же особенности решаемой задачи — дихотомия элементов, связанная с золотой пропорцией. Интерес состоит не столько в констатации этой, безусловно, важной зависимости, сколько в указании перспектив: ведь и материалы, и матрицы в состоянии иметь еще и другие, кроме известных, виды, причем вторые могут привлекаться для предсказания существования, а затем и для анализа первых.

Динамическая модель нова, она указывает на полезную связь с теориями динамических систем, линейных операторов, случайных аттракторов и т. п. с их математическим аппаратом, столь необходимым в развитии взглядов на материалы в обобщенной кристаллографии.

## Литература

1. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W. Metallic Phase with LongRange Orientational Order and No Translational Symmetry // *Physical Review Letters*. 1984. Vol. 53. P. 1951–1953.
2. Penrose R. Pentaplexity // *Eureka*. 1978. Vol. 39. P. 16–22.
3. Penrose R. *The Emperor's New Mind: Concerning Computers, Minds and the Laws of Physics*. — Oxford University Press, 1989. — 480 p.
4. Мадисон А. Е. Симметрия квазикристаллов // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55. Вып. 4. С. 784–796.
5. Steurer W., Deloudi S. *Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures*. — Springer, 2009. — 384 p.
6. Hyde S., et al. *The Language of Shape. The Role of Curvature in Condensed Matter Physics, Chemistry and Biology*/ S. Hyde, S. Andersson, K. Larsson, Z. Blum, T. Landh, S. Lidin, B. W. Ninham. — Elsevier, 1997. — 383 p.
7. Lord E. A., Mackay A. L., Ranganathan S. *New Geometries for New Materials*. — Cambridge University Press, 2006. — 235 p.
8. Грациа Д. Квазикристаллы // *УФН*. 1988. Т. 156. Вып. 2. С. 112–124.
9. Балонин Н. А., Сергеев М. Б. М-матрицы и кристаллические структуры // *Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г. И. Носова*. 2013. № 3. С. 58–61.
10. Балонин Н. А., Сергеев М. Б. Матрицы локального максимума детерминанта // *Информационно-управляющие системы*. 2014. № 1. С. 2–14.
11. Вехилов Ю. Х., Черников М. А. Квазикристаллы // *Успехи физических наук*. 2010. Т. 180. № 6. С. 561–586.
12. Балонин Н. А., Сергеев М. Б. Матрица золотого сечения G10 // *Информационно-управляющие системы*. 2013. № 6(67). С. 2–5.
13. Балонин Н. А. Матрицы золотого сечения. <http://mathscinet.ru/catalogue/gold/> (дата обращения: 05.04.2016).

UDC 519.614

doi:10.15217/issn1684-8853.2016.4.26

## Matrix Models of Generalized Crystallography

Balonin N. A.<sup>a</sup>, Dr. Sc., Tech., Professor, korbendfs@mail.ruSergeev M. B.<sup>a</sup>, Dr. Sc., Tech., Professor, mbse@mail.ruSuzdal V. S.<sup>b</sup>, Dr. Sc., Tech., Professor, suzdal@isma.kharkov.ua<sup>a</sup>Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, 67, B. Morskaya St., 190000, Saint-Petersburg, Russian Federation<sup>b</sup>Institute for Scintillation Materials National Academy of Sciences of Ukraine, 60, Lenin ave., 61001, Kharkiv, Ukraine

**Purpose:** We develop common approaches to building matrix models of generalized crystallography. **Results:** The conjecture was proved that each quasicrystal meets an associated quasiorthogonal matrix. D. Shechtman's quasicrystal corresponds to the golden ratio matrix. It is concluded that for ordered structures consisting of two endlessly repeating units, a model which would reflect the details of the structure may be a modularly two-leveled golden ratio matrix. **Practical relevance:** The prospects of further research have been determined. Both the materials and the associated matrices can have a few modifications. Quasiorthogonal matrices can be involved to predict the existence of materials and, after that, for their analysis. The corresponding software has been developed for mathematical Internet.

**Keywords** — Crystalline Structures, Quasicrystals, Orthogonal Matrices, Golden Ratio, Golden Ratio Matrix, Belevitch Matrix, Mersenne Matrix, Dynamical Systems, Strange Attractor.

## References

1. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W. Metallic Phase with LongRange Orientational Order and No Translational Symmetry. *Physical Review Letters*, 1984, no. 53, pp. 1951–1953.
2. Penrose R. Pentaplexity. *Eureka*, 1978, no. 39, pp. 16–22.
3. Penrose R. *The Emperor's New Mind: Concerning Computers, Minds and the Laws of Physics*. Oxford University Press, 1989. 480 p.
4. Madison A. E. The Symmetry of Quasicrystals. *Fizika tverdogo tela*, 2013, no. 4 (55), pp. 784–796 (In Russian).
5. Steurer W., Deloudi S. *Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures*. Springer, 2009. 384 p.
6. Hyde S., Andersson S., Larsson K., Blum Z., Landh T., Lidin S., Ninham B. W. *The Language of Shape. The Role of Curvature in Condensed Matter Physics, Chemistry and Biology*. Elsevier, 1997. 383 p.
7. Lord E. A., Mackay A. L., Ranganathan S. *New Geometries for New Materials*. Cambridge University Press, 2006. 235 p.
8. Gratia D. Quasi-Crystals. *UFN*, 1988, no. 2 (156), pp. 11–124 (In Russian).
9. Balonin N. A., Sergeev M. B. M-Matrices and Crystal Structures. *Vestnik Magnitogorskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. G. I. Nosova*, 2013, no. 3, pp. 58–61 (In Russian).
10. Balonin N. A., Sergeev M. B. Local Maximum Determinant Matrices. *Informatsionno-upravliaiushchie sistemy* [Information and Control Systems], 2014, no. 1(68), pp. 2–14 (In Russian).
11. Vekhilov Yu. Kh., Chernikov M. A. Quasi-Crystals. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2010, no. 6 (180), pp. 561–586 (In Russian).
12. Balonin N. A., Sergeev M. B. Matrix of Golden Ratio G10. *Informatsionno-upravliaiushchie sistemy* [Information and Control Systems], 2013, no. 6(67), pp. 2–5 (In Russian).
13. Balonin N. A. *Matritsy zolotogo secheniia* [Golden Ratio Matrices]. Available at: <http://mathscinet.ru/catalogue/gold/> (accessed 5 April 2016).