















Візуалізація локальної оболонки одновимірного квазікристала

Михайло Корешков, Марина Нестеренко

Відділ математичної фізики Інституту математики НАН України, Київ, Україна
Університет "Київська Школа Економіки", Київ, Україна

Міжнародна конференція молодих математиків
4 червня 2026 р.

Кристалографічні симетрії

Crystal family	Lattice system	Point group (Schönflies notation)	14 Bravais lattices			
			Primitive (P)	Base-centered (S)	Body-centered (I)	Face-centered (F)
Triclinic (a)		C_1				
Monoclinic (m)		C_{2h}				
Orthorhombic (o)		D_{2h}				
Tetragonal (t)		D_{4h}				
Hexagonal (h)	Rhombohedral	D_{3d}				
	Hexagonal		D_{6h}			
Cubic (c)		O_h				

Гратка Браве $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$

\mathbb{R}^d / Γ – компактна топологічна група.

$\Gamma = \mathbb{Z}b_1 \oplus \mathbb{Z}b_2 \oplus \dots \oplus \mathbb{Z}b_d$.

b_1, \dots, b_n лінійно незалежні.

Рис. 1: Кристалографічні ґратки у 3D
(Bravais lattice on wiki)

Нехай $S \subset \mathbb{R}^d$.

$t \in \mathbb{R}^d$ - період S , якщо $t + S = S$.

Точкову множину S називають кристалографічною, якщо її періоди утворюють ґратку Браве.

Теорема (“Кристалографічне обмеження” — The crystallographic restriction)

Нехай $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ - кристалографічна точкова множина, $R \in O(d)$ - ортогональний оператор, що переводить Γ в себе ($R\Gamma = \Gamma$).

Тоді оператор R має скінченний період k , $(R)^k = \text{id}$.

При чому для розмірності $d = 1$ маємо $k \in \{1, 2\}$,
для розмірностей $d = 2$ та $d = 3$ маємо $k \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$.

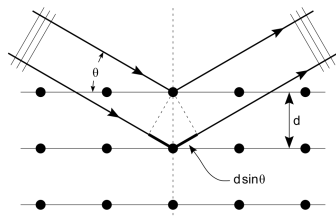


Рис. 2: Дифракція на ґратці (з wiki)

Ґратка як набір паралельних шарів. Bragg's Law.

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (|\vec{k}| = \lambda)$$

Гребінець Дірака

$$\omega = \omega_\Gamma = \sum_{x \in \Gamma} \delta_x$$

Автокореляція (функція Патерсона)

$$\gamma_\omega := \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\text{vol}(B_r(0))} \sum_{x, y \in \Gamma \cap B_r(0)} \delta_{x-y} = \sum_{z \in \Delta} \nu(z) \delta_z$$

Дифракційний малюнок $\hat{\gamma}_\omega$ — інтенсивність перетворення Фур'є, перетворення Фур'є автокореляції.

Дифракція на ґратці (довідково)

Нехай Γ — ґратка

$$\Delta = \Gamma - \Gamma = \Gamma$$

$$\gamma_\omega = \frac{1}{\det(b_1, b_2, \dots, b_d)} \sum_{x \in \Gamma} \delta_x$$

Дуальна ґратка

$$\Gamma^* = \{y \in \mathbb{R}^d \mid \forall x \in \Gamma: x \cdot y = 0\}$$

Інтерпретація через пласкі хвилі

$$A_k(r) = e^{2\pi k \cdot r}$$

$$\forall r \in \Gamma, k \in \Gamma^* : A_k(r) = 1$$

Наслідок формули сумування Пуасона

$$\widehat{\omega} = \sum_{x \in \Gamma} \widehat{\delta_x} = d \sum_{y \in \Gamma^*} \delta_y$$

Дифракційний малюнок

$$\widehat{\gamma}_\omega = d^2 \sum_{y \in \Gamma^*} \delta_y$$

Дискретна множина піків на дуальній ґратці.

Визначення (наївне визначення)

Кристал – структура із дискретним дифракційним малюнком

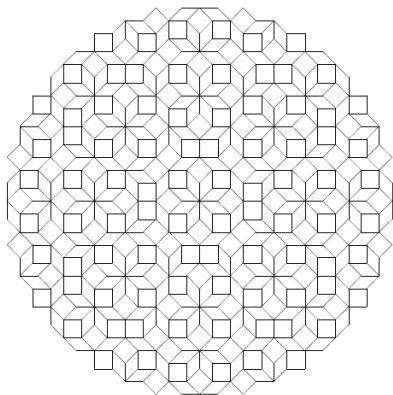


Рис. 3: 8-симетричне заощення Амман-Бієнкера. Не має кристалографічної симетрії. [1, р. 3]

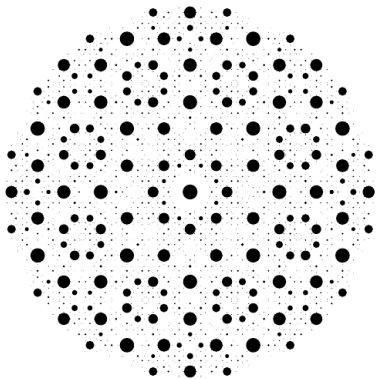


Рис. 4: Дифракційний малюнок 8-симетричного заощення Амман-Бієнкера. Розмір дисків пропорційний інтенсивності піку. Зображено піки інтенсивності більше за 0.1% центрального. [1, р. 3]

Сума хвиль із ірраціональними частотами. Найпростіша конструкція:

$$f(x) = \sin(x) + \sin(\tau x) =$$
$$u(x, y)|_{y=\tau x} = \sin(x) + \sin(y)|_{y=\tau x}$$
$$f(x) = u(x, y)|_{y=\tau x} = \sin(x) + \sin(y)|_{y=\tau x}$$

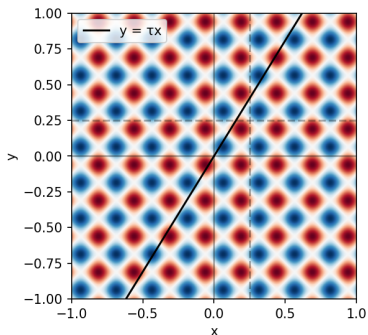


Рис. 5: Графік $u(x, y)$

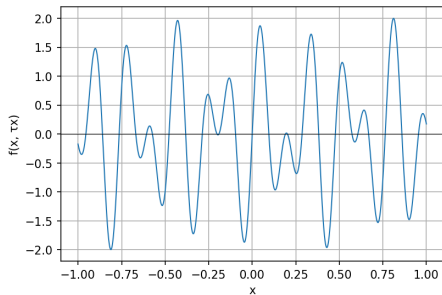


Рис. 6: Графік $f(x)$

Модельна множина Λ згідно методу перетинів та проєкцій (cut and project). [2]

$$\begin{array}{ccccc}
 \mathbb{R}^d & \xleftarrow{\parallel} & \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d & \xrightarrow{\perp} & \mathbb{R}^d \\
 & & \cup & & \\
 L & \xleftarrow{1-1} & \tilde{L} & \xrightarrow{\text{щільний образ}} & L'
 \end{array}$$

- ❶ $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ – вікно
- ❷ $\tilde{L} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ – ґратка
- ❸ $\Lambda = \Lambda(\Omega) = \{x \mid \tilde{x} \in L, x' \in \Omega\} \subset L$ – модельна множина
- ❹ “Ірраціональна проєкція” $\pi_{\perp}(\tilde{L})$ забезпечує щільність L' у \mathbb{R}^d , неперіодичність.

За умови правильного вибору вікна Ω , таку конструкцію назвемо **математичним квазікристалом**.

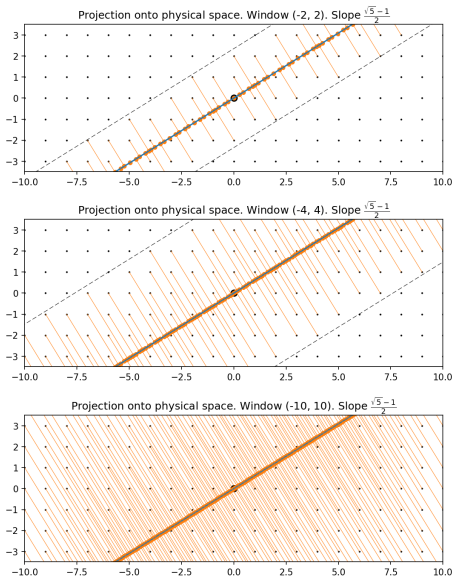


Рис. 7: Проекція ґратки на підпростір під ірраціональним кутом.

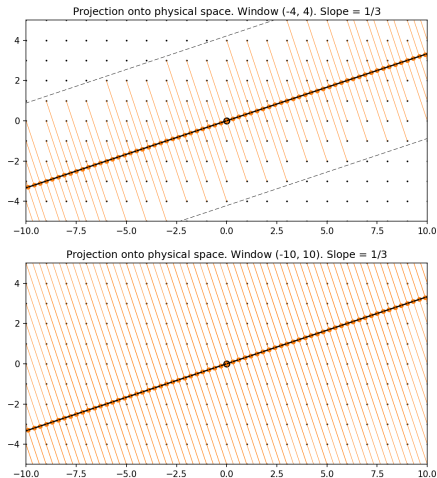


Рис. 8: Проекція ґратки на підпростір під раціональним кутом. Модельна множина стає періодичною.

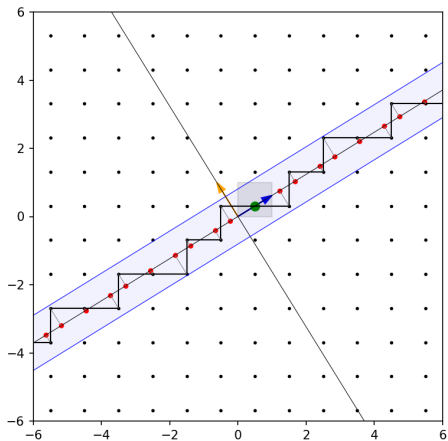


Рис. 9: Квазікристал Фібоначі як проєкція регулярної ґратки \mathbb{Z}^2 на пряму $y = \frac{2}{1+\sqrt{5}} \cdot x$ із ірраціональним кутом.

- Математичні квазікристали є ідеалізованою моделлю **фізичних квазікристалів**, в яких атоми та молекули замінені точками.
- За відкриття фізичних квазікристалів було присуджено Нобелівську премію з хімії 2011 року.
- Матеріали на основі квазікристалів мають унікальні властивості з точки зору міцності, теплопровідності, оптики тощо.
- Математичні моделі використовуються для обчислень фізичних характеристик та прогнозування властивостей.
- Функції, які поважають структуру квазікристала (локальні функції) відповідають полям фізичних величин у квазікристалі.

Визначення

Множина $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ називається Делонівською (Delone set), якщо існують $r, R > 0$ такі, що $\min\{\|x - y\| : x, y \in \Lambda, y \neq x\} \geq r$ та $\max_x \min\{\|x - y\| : y \in \Lambda\} \leq R$.

Модельні множини є Делонівськими.

Делонівські множини Λ_1 та Λ_2 близькі якщо

$$\Lambda_1 \cap B_R \subset \Lambda_2 + B_\epsilon$$

$$\Lambda_2 \cap B_R \subset \Lambda_1 + B_\epsilon$$

Chabauty topology, Fell topology, Hausdorff distance.

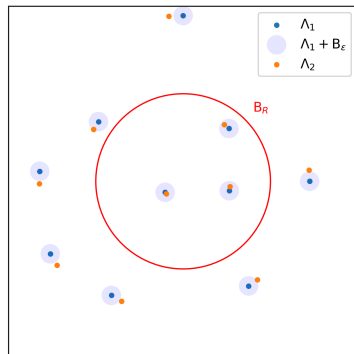


Рис. 10: Топологія на множинах Делоне.

Визначення (Локальна оболонка)

$$X(\Lambda) = \overline{\{t + \Lambda : t \in \mathbb{R}^d\}}$$

Замикання орбіти Λ відносно топології на множинах Делоне.

Лема (Твердження)

Якщо $C \in X(\Lambda)$, то

$$\forall R : \exists s, t \in \mathbb{R}^d : (C - t) \cap B_R = (\Lambda - s) \cap B_R,$$

тобто будь-який локальний патерн C можна знайти в Λ з точністю до зсуву. Кажуть, що C та Λ локально еквівалентні чи локально нерозрізненні (LI). $X(\Lambda)$ називають класом локальної еквівалентності.

Теорема

$X(\Lambda)$ - компакт [3]

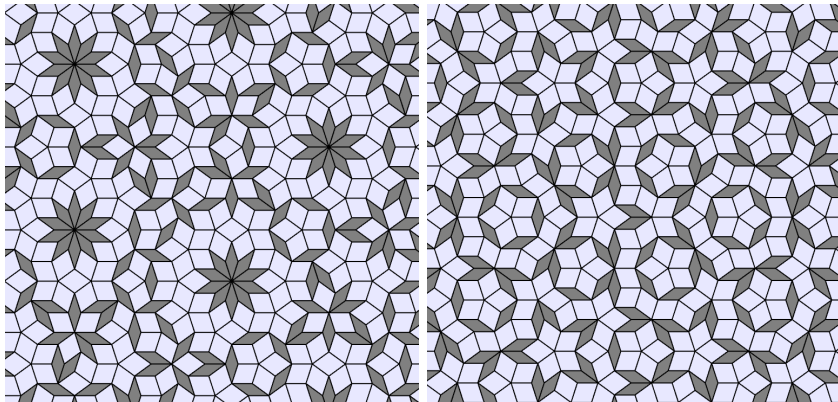


Рис. 11: Дві реалізації замоцнення Пенроуза, елементи локальної оболонки. Згенеровано з допомогою [4]

Локальна оболонка замоцнення Пенроуза містить всі можливі замоцнення площини, породжені цими десятима плитками.

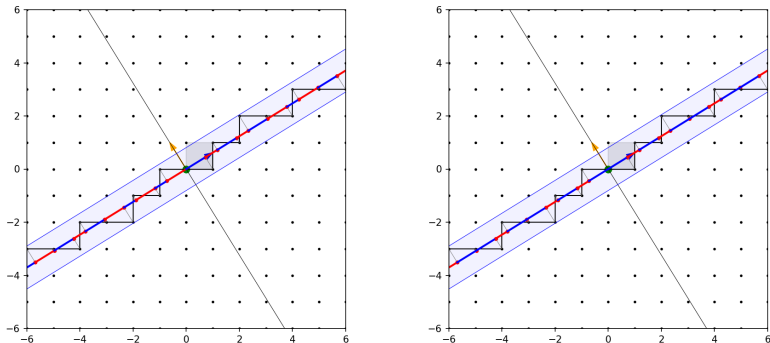


Рис. 12: Замощення, що відповідають квазікристалу Фібоначі. (а) Сусідні плитки мають різні кольори. (б) Плитки розфарбовані за типом (довжиною).

$$\tilde{x} \in \tilde{L}, \quad x = \pi_{phys}(\tilde{x}), \quad x' = \pi_{int}(\tilde{x})$$

$$\Lambda = \Lambda(W) = \{x \in L : x' \in W\} = \pi_{phys}(\tilde{L} \cap \pi_{int}^{-1}(W)),$$

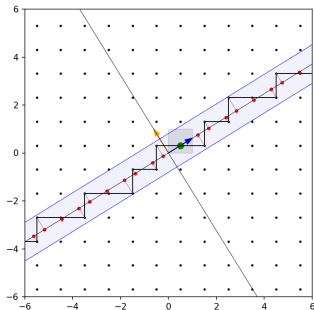
$$\Lambda_{(a,b)} = a + \Lambda(-b + W) = \{x + a : x \in L, x' + b \in W\}.$$

$$(a, b)_L = \{(a', b') \mid \Lambda_{(a', b')} = \Lambda_{(a,b)}\}.$$

Теорема

$X(\Lambda)$ параметризується тором $\mathbb{R}^d / \mathbb{Z}^d$ однозначно майже всюди (torus parametrization). [5]

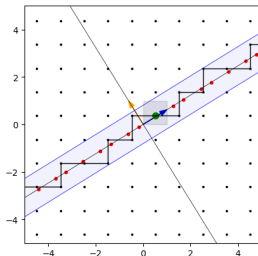
Нагадування: \tilde{L} – це решітка.



Інтерактивна демонстрація параметризації тором

```
... x —○— 0.516
... y —○— 0.363
... tau = 1.618, tau' = -0.618, 1/tau = 0.618
... uv coordinates: 0.535720, 0.031907
... xy coordinates: 0.516000, 0.363000
... W = -0.688, 0.688
... pos_chain: 9 points, neg_chain: 10 points
... CHAIN
... aabaababa|ababaaba
```

Figure 1



<https://github.com/mkrooted256/fibonacci-torus-notebook/>

Приклад: потенціал квазікристала як локальна функція відносно $X(\Lambda)$.

Quasicrystal: 7 waves, 20 periods
Shifted by (2, 2).

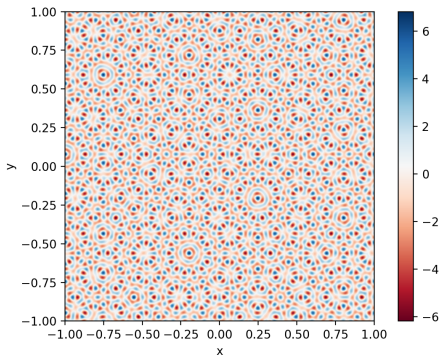


Рис. 13: Сума 7 плоских хвиль навколо (2, 2)

FFT of Quasicrystal (log1p): 7 waves, 20 periods

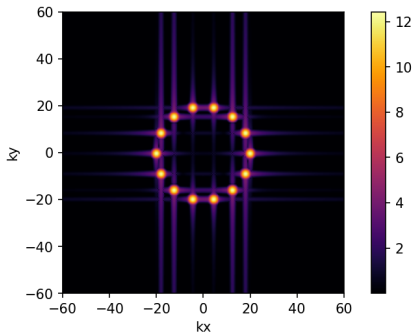


Рис. 14: Дискретне перетворення Фур'є (gaussian mask, log scale)

Подальші напрямки дослідження

- Побудова та обчислення конкретних локальних функцій.
- Теорія L_2 функцій на торі як модель локальних функцій.
- Застосування Фур'є аналізу на торі для наближення локальних функцій.

Дякую за увагу

Михайло Корешков

*аспірант відділу математичної фізики
Інституту математики НАН України
mykhailo.koreshkov@gmail.com*

Марина Нестеренко

*доктор фізико-математичних наук,
провідна наукова співробітниця Інституту математики НАН України,
заступниця декана факультету математики з наукової роботи
Київської школи економіки*



Проект 2025.07/0405 "Алгебраїчні методи дослідження рівнянь математичної фізики" реалізується завдяки грантовій підтримці Національного фонду досліджень України. Зміст, висвітлений в цій роботі, може не співпадати з поглядами Національного фонду досліджень України і є виключною відповідальністю Інституту математики НАН України.



M. Baake, "A guide to mathematical quasicrystals," 1999. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/math-ph/9901014>



R. Moody, M. Nesterenko, and J. Patera, "Computing with almost periodic functions," *Foundations of Crystallography*, vol. 64, no. 6, pp. 654–669, 2008. [Online]. Available: <https://arxiv.org/abs/0808.1814v1>



C. Radin and M. Wolff, "Space tilings and local isomorphism," *Geometriae Dedicata*, vol. 42, no. 3, pp. 355–360, 1992. [Online]. Available: <https://web.ma.utexas.edu/users/radin/papers/local-isomorphism-s.pdf>



G. Glouster, "Cut and project tiling applet on github," 2018. [Online]. Available: <https://ggglouster.github.io/cut-and-project-tiling/>



M. Baake, J. Hermisson, and P. A. B. Pleasants, "The torus parametrization of quasiperiodic li-classes," *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 30, no. 9, p. 3029, may 1997. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1088/0305-4470/30/9/016>