Інститут математики НАН України, Київ

Квазікристали, майже періодичні структури та їх моделювання

21 вересня 2026 р.

Доміно Хао Вана 1961

Плитки Вана — клас формальних систем у вигляді квадратів з кольоровими сторонами.
Гіпотеза Вана (1961): Якщо скінченне число плиток Вана може замостити площину, то існує періодичне замощення.
Роберт Бергер (1966) спростував гіпотезу Вана, показавши, як перетворити будь-яку машину Тюрінга на набір плиток Вана.

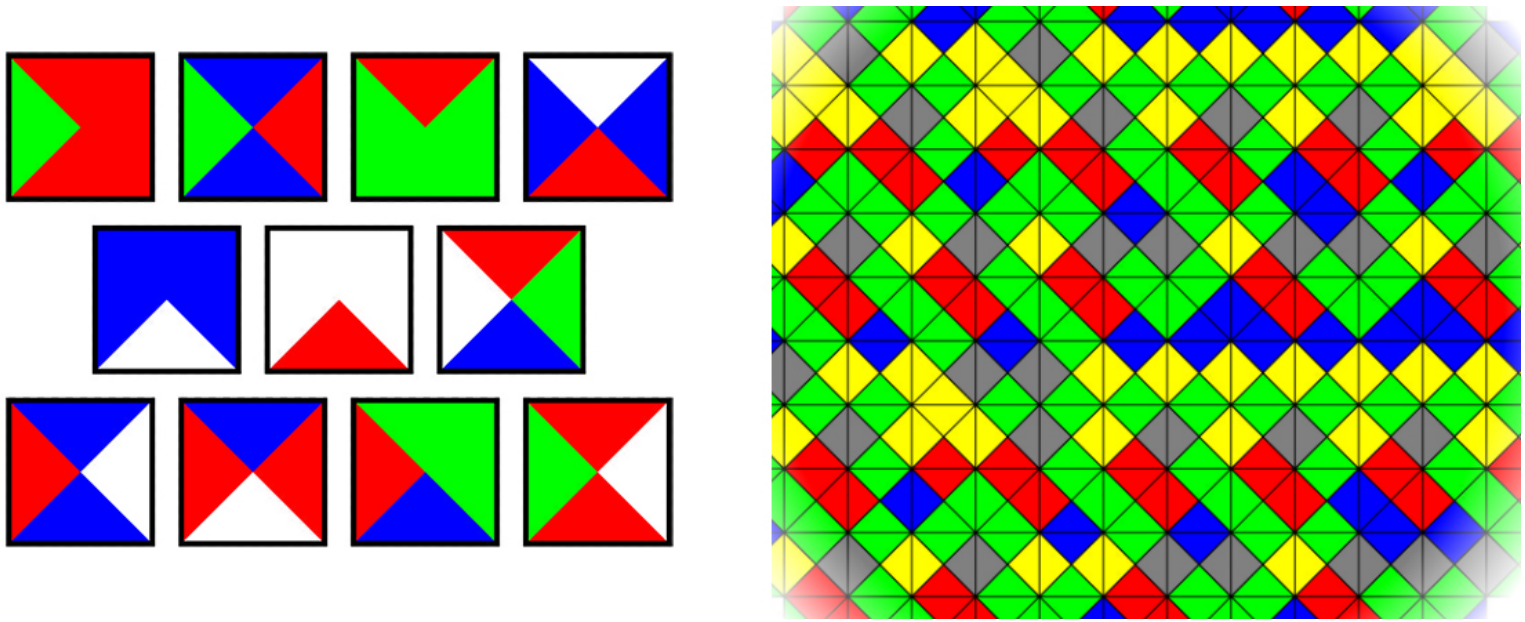
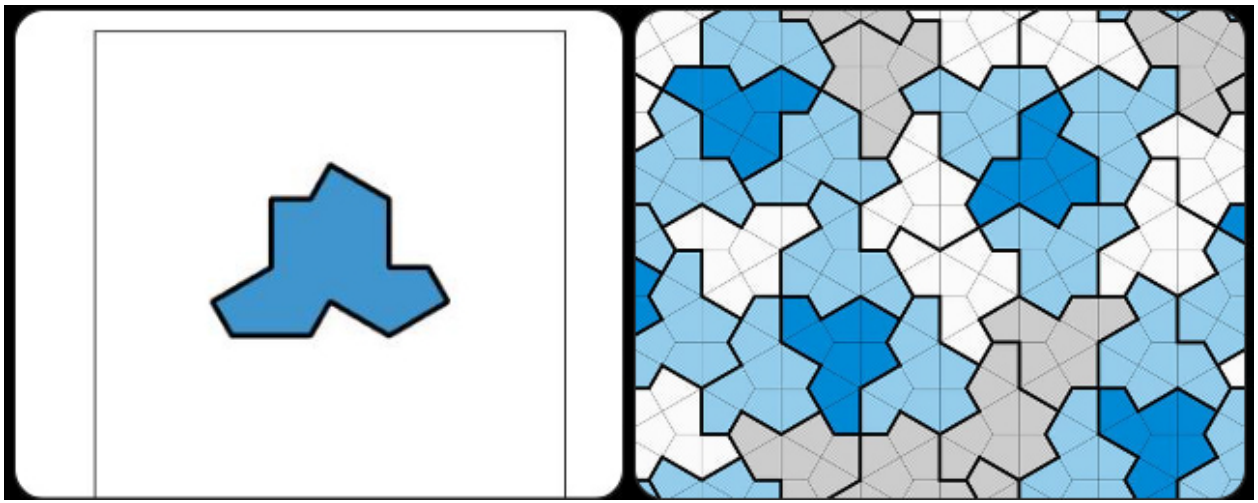
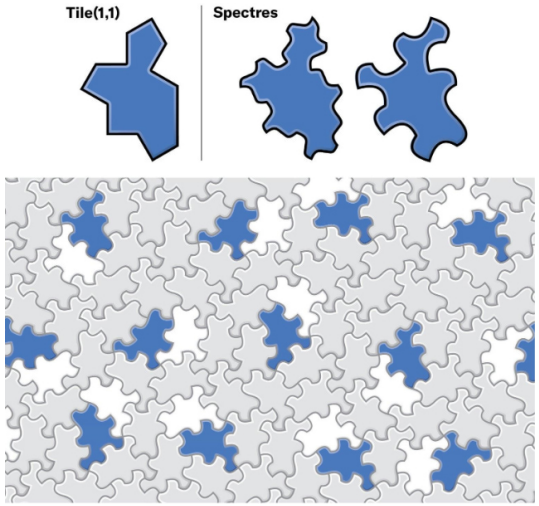


Рис.: Ліворуч: 11 плиток Вана, що дають неперіодичне замощення площини, праворуч: неперіодичне замощення за допомогою 13 плиток.

Плиткb "Капелюх"та "Привид"

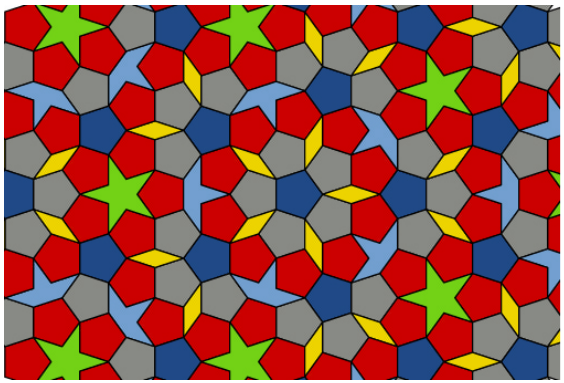
У 2023 році було розв'язано одну з найвідоміших відкритих задач теорії замощень - проблему Ейнштейна - відкриття однієї-єдиної плитки, яка може замостити всю площину лише неперіодично (David Smith, Joseph Samuel Myers, Craig S. Kaplan, Chaim Goodman-Strauss).





Мозаїки Пенроуза

R. Penrose, The role of aesthetics in pure and applied mathematical research, Bull. Institute Math. Appl. 10(1974), 266ff.



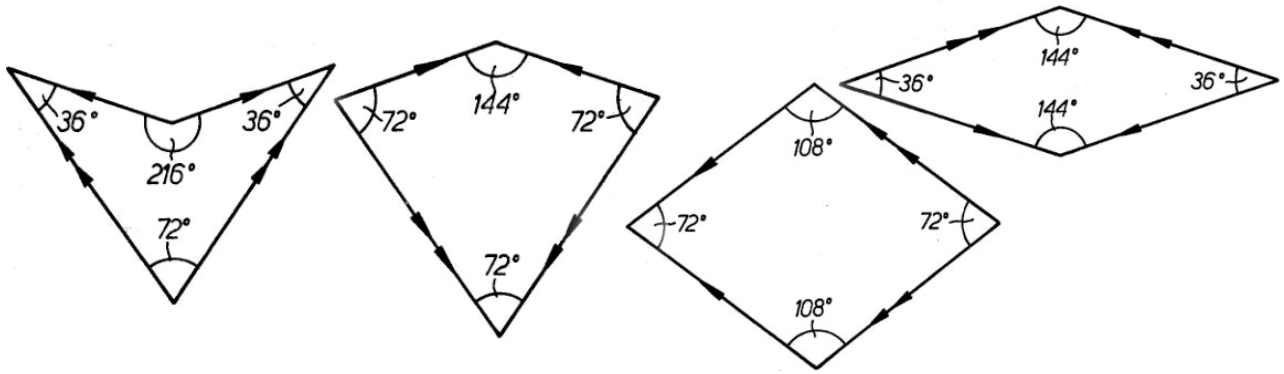


Рис.: P1: Оригінальна п'ятикутна мозаїка Пенроуза. P2: Повітряні змії та дротики. P3: Ромби.

Фізичні квазікристали

Д. Шехтман (1984, 2011), І. Блех, Д. Гратіас і Дж. Кан — відкриття структури швидкоохолодженого сплаву Mn-Al. Кристалографія: осьова симетрія лише 1-, 2-, 3-, 4- і 6-го порядків.

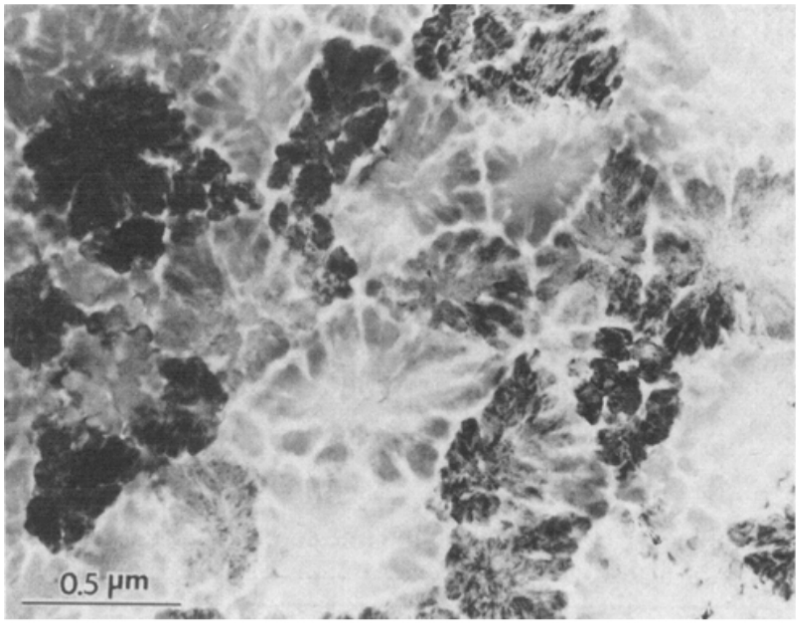


Fig. 1 — The microstructure of rapidly solidified Al_6Mn.

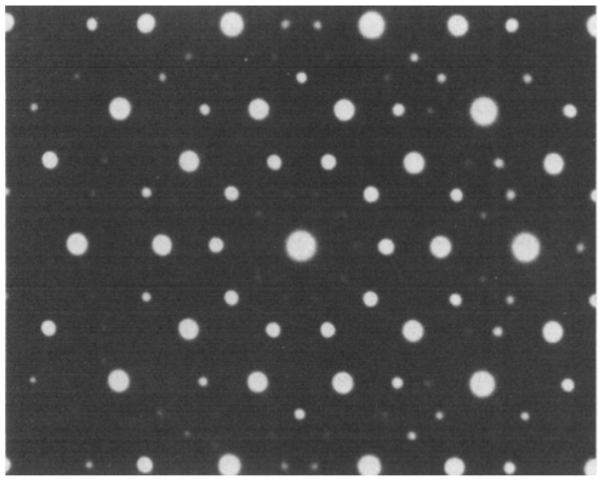


Fig. 3 — Selected area diffraction pattern taken from a single spherulite Note the five-fold symmetry of the pattern.

Al-Li-Cu, Al-Mn-Si, Al-Ni-Co, Al-Pd-Mn, Al-Cu-Fe, Al-Cu-V, Cd-Yb, Ti-Zr-Na, Zn-Mg-Ho, Zn-Mg-Sc, In-Ag-Yb, Pd-U-Si, (Fe-Cu-Al)

Фрактальний поділ (інфляція)

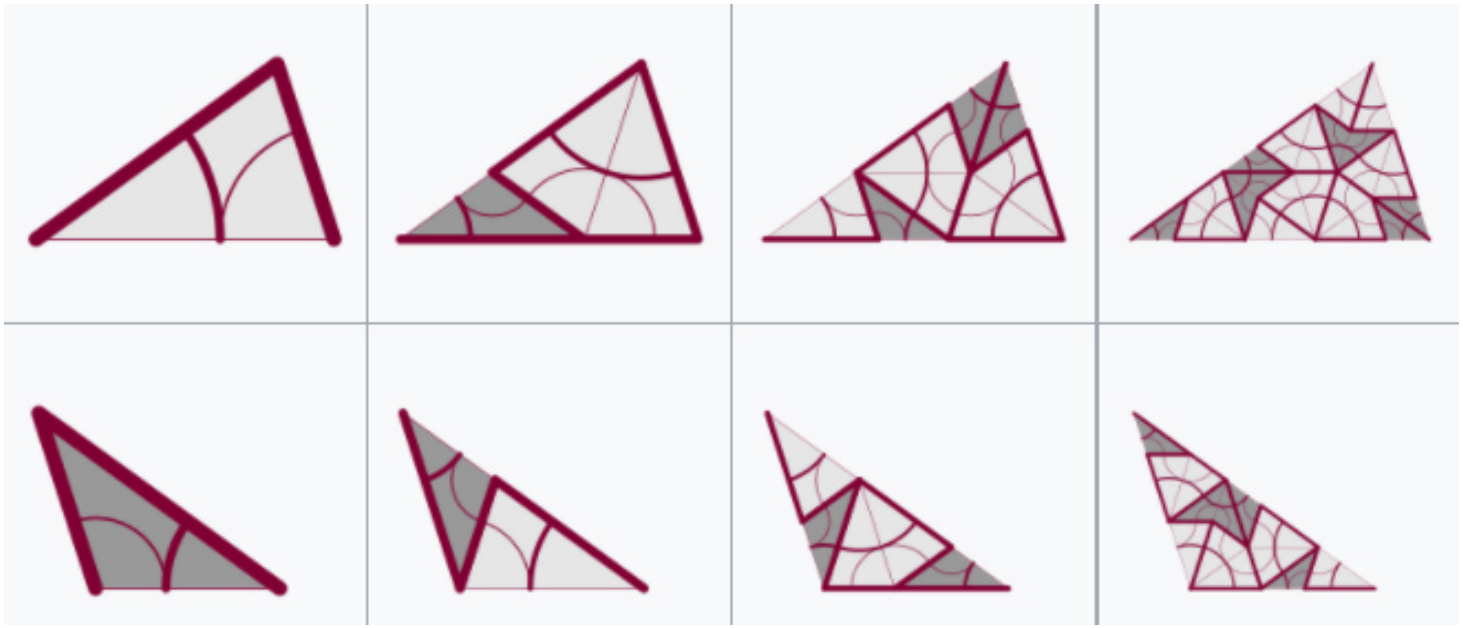
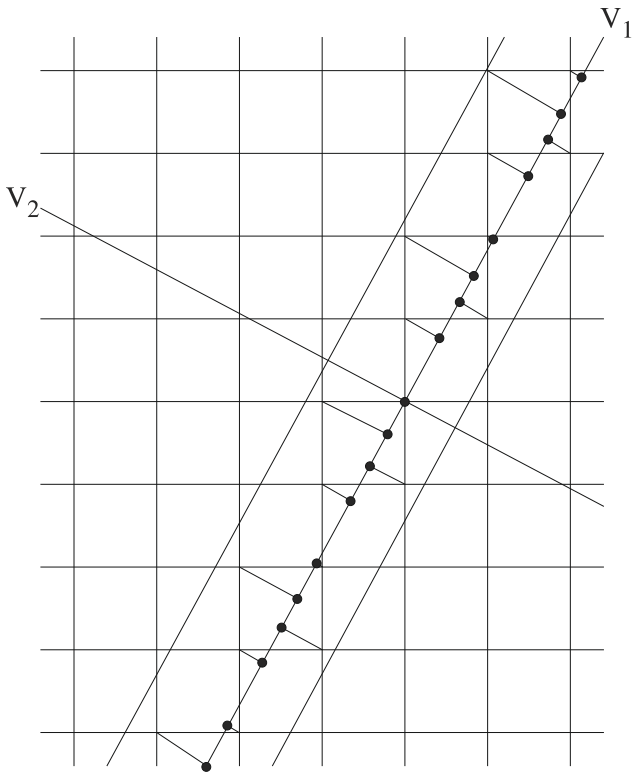


Рис.: Подрібнення мозаїки Пенроуза P2.

Одновимірний квазікристал

Оберемо дві прямі $V_1 : y = \tau x$ та $V_2 : y = \tau' x$ на квадратній решітці $\mathbb{Z}_2$



Точка решітки $\mathbb{Z}_2$ стає точкою квазікристалу, після проекції на V_1, за умови, якщо її проекція на V_2 потрапляє у вікно Ω, тобто якщо вона до проекції належала ‘перерізу’.

Загальний метод перерізів та проєкцій

Точкові множини $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ — множини перерізів та проєкцій.

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

$\widetilde{L}$ — це ґратка в $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, яка орієнтована так, що її проєкції ґратки будуть щільними та взаємно однозначними.
$\mathbb{R}^d$ ліворуч — фізичний простір (йому належить квазікристал Λ).
$\mathbb{R}^d$ праворуч — внутрішній простір, який використовується для контролю проєкції ґратки $\widetilde{L}$ у фізичний простір.
L — образ $\widetilde{L}$ під дією проєкції у фізичний простір.
$\tilde{x} = (x, x') \in \widetilde{L}$, де $x \in L$. Перетворення $(\,\cdot\,)'$ пов'язує фізичний та внутрішній простори: $(\,\cdot\,)' \colon L \to L'$, при цьому $x \mapsto x'$.
Вікно Ω — множина у внутрішньому просторі, яка співпадає зі своїм замиканням та має границю міри нуль.
Квазікристал $\Lambda(\Omega) := \{x \mid \tilde{x} \in \widetilde{L},\ x' \in \Omega\}$.

Наближення майже періодичних функцій

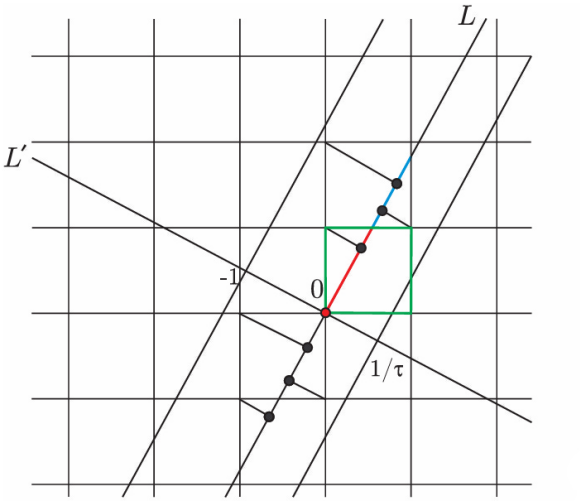
1. Підняття майже періодичної функції f на тор: $f(t) = F(\xi)$, де $\xi = (t, 0) \bmod \widetilde{L}$;
2. Розклад F у ряд Фур'є: $F(\xi) = \sum_{\tilde{k} \in \tilde{M}} a_{\tilde{k}}\, e^{2\pi i \tilde{k} \cdot \xi}$, де $\tilde{M}$ — дуальна до $\widetilde{L}$;
3. Наближення $a_{\tilde{k}}$ за аналогом ергодичної теореми Біркгофа

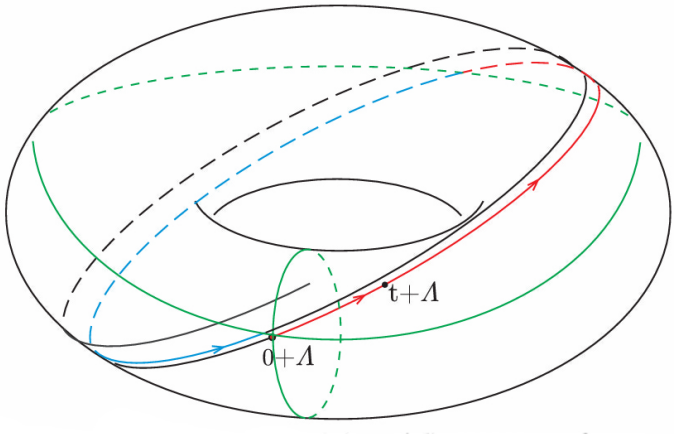
$$a_{\tilde{k}} = \int_{\mathbb{T}} e^{-2\pi i \tilde{k} \cdot \xi} F(\xi)\, d\xi \xleftarrow{R \to \infty} \frac{1}{R} \int_0^R e^{-2\pi i k \cdot t} f(t)\, dt.$$

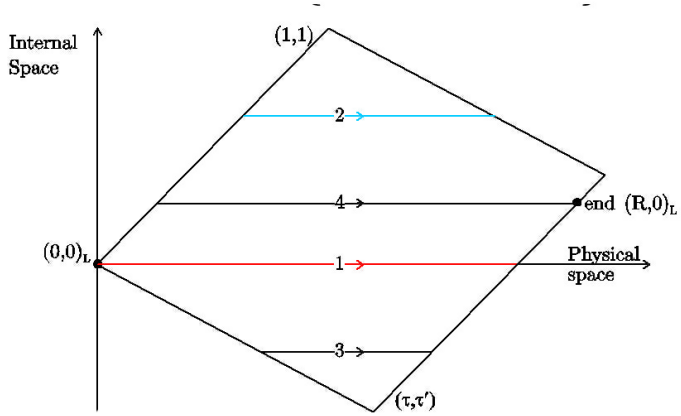
4. Дискретизація.
5. Обчислення точок даних D у $\mathbb{R}$.
6. Наближення коефіцієнтів з пункту 3.

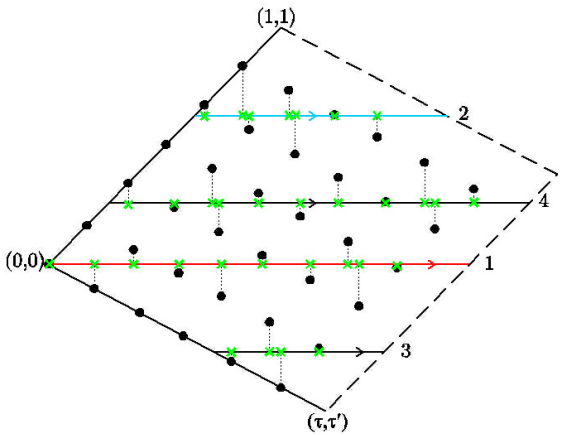
$$a_k = \sum_{\substack{T_j \in \frac{1}{N}\widetilde{L} \cap C \\ \tilde{k} \in \tilde{M}/N\tilde{M}}} e^{-2\pi i \tilde{k} t \cdot T_j} F(T_j) \approx \frac{1}{R} \sum_{t_j \in D} e^{-2\pi i k \cdot t_j} f(t_j).$$

Перехід на фундаментальну область і дискретизація









Алотропні модифікації вуглецю

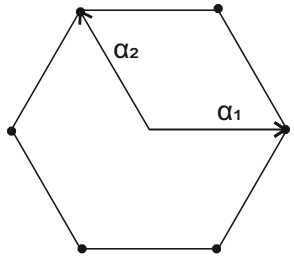


Рис.: Базова шестикутна плитка мозаїки побудована з простих коренів алгебри A_2, вершини повністю співпадають з кореневою системою.

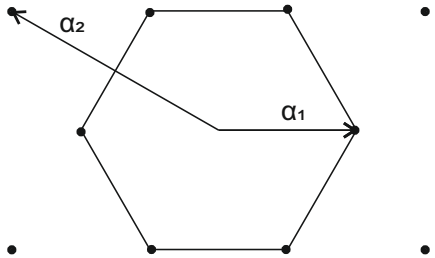


Рис.: Точки кореневої системи алгебри G_2 та базова шестикутна плитка мозаїки побудована лише з коротких коренів. Частина кореневої системи, що відповідає нормальній підгрупі W_1 є зайвою і опускається.

Графен

Графен — майже прозорий матеріал, який є першим двовимірний матеріалом товщиною всього один атом.

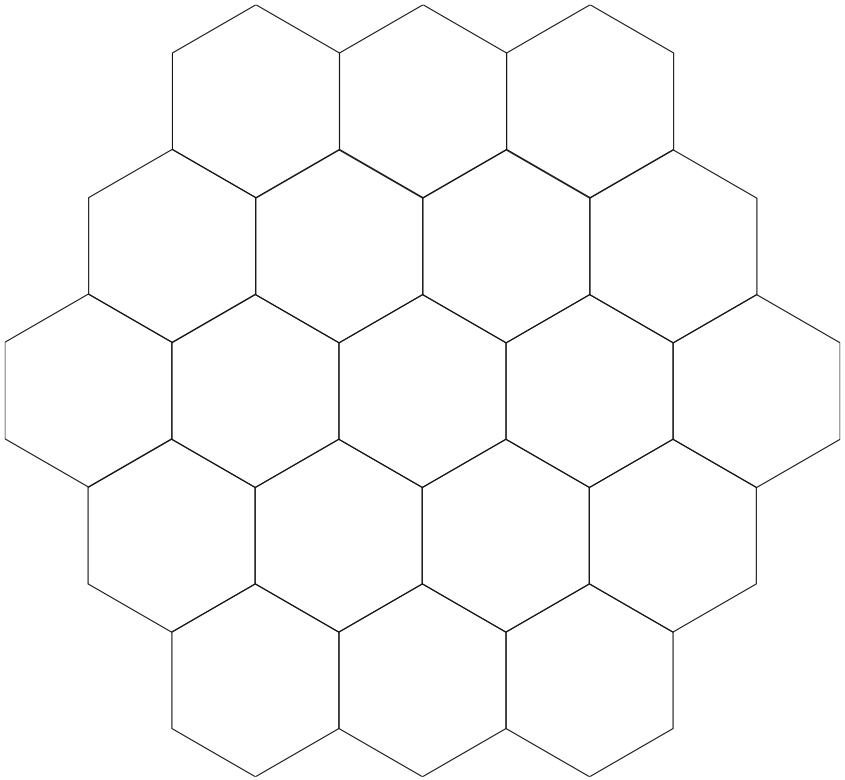


Рис.: Фрагмент графену побудованого відображеннями $r_0, \ldots, r_n$ фундаментальної шестикутної плитки відносно її ребер.

Нанотрубки та нанокільця

Вуглецеві нанотрубки — алотропна модифікація карбону, вони мають форму тонких порожніх циліндрів. Нанотрубки будуються з скінченої парної кількості пасків розташованих зі зсувом на половину базової плитки і з'єднаних між собою без утворення додаткових плиток мозаїки, при цьому вільні ребра крайніх пасків ототожнюються (математична 'склейка'). Парність набору пасків є суттєвою, оскільки склейка непарної кількості пасків призводить до появи нових не шестикутних (ромбовидних) плиток.
Мінімальна (найтонша) нанотрубка утворюється двома нескінченими пасками.

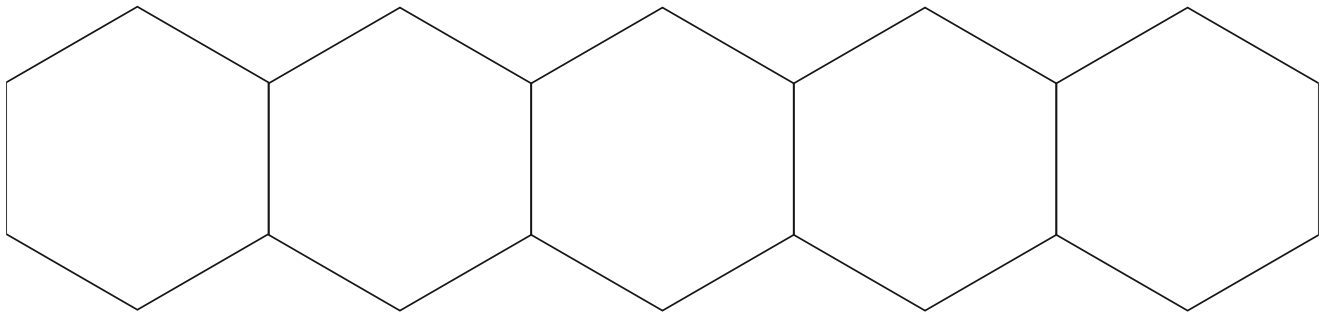


Рис.: Базовий пасок з шестикутників для побудови нанотрубок.

Фулерени

Фулерени — речовини, що складаються тільки з карбонових елементів і мають сферичну, еліптичну або трубчасту структуру. Структура фулерену подібна до графіту, відмінність полягає в тому, що в фулерені зустрічаються п'ятичленні кільця (грані у формі правильного п'ятикутника), а найвідомішим є фулерен C_{60}.

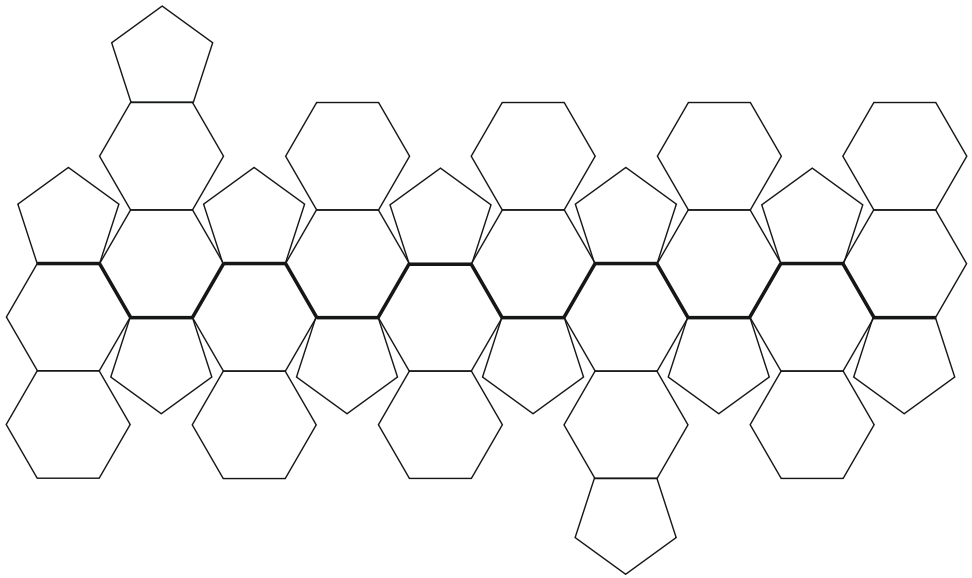
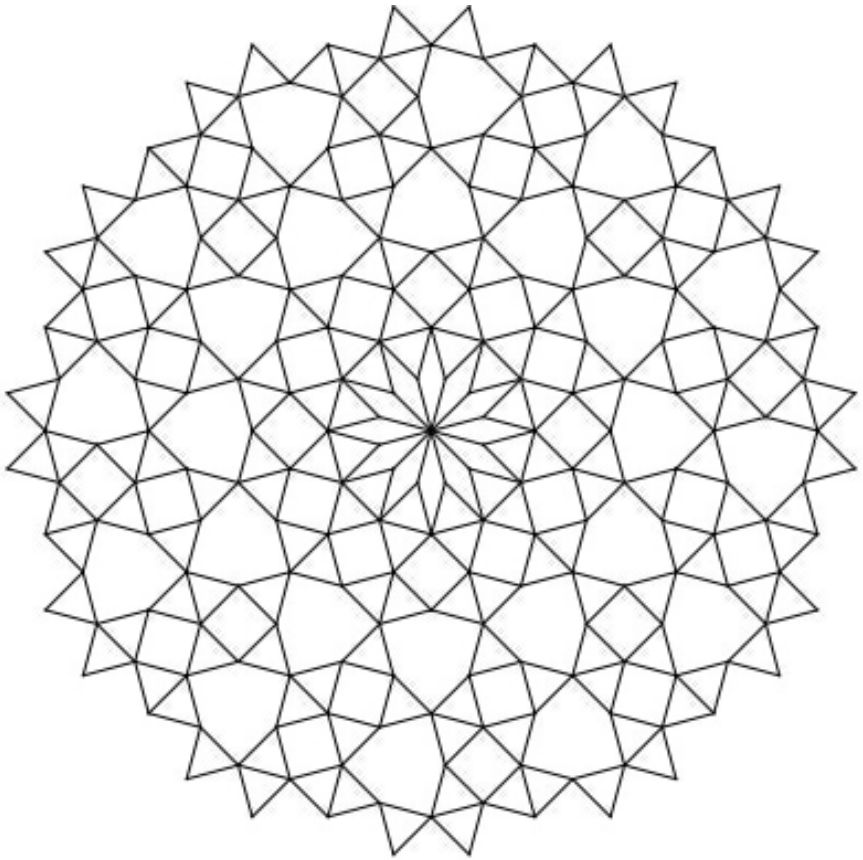


Рис.: Розріз фулерену C_{60}. Для побудови нанотрубок відбувається вклейка зигзагів з шестикутників у розріз позначений потовщеною суцільною лінією.

Задача: побудувати математичну модель щитового квазікристала

На дифракційних картинах сплавів (Al-Mn, Zn-Mg-Ho, Al-Cu-Fe, Al-Pd-Mn) часто виникають неперіодичні замощення що складаються з квадратів, правильних трикутників та шестикутників-"щитів".



Вибір граток з осьовою симетрією 12го порядку

Ми використовуємо кореневу гратку простої групи Лі F_4 у 4-вимірному просторі. Ця гратка має необхідну поворотну симетрію з 4 простими коненями, які можна використати у парах для проекцій на двовимірні простори.

У фізичному просторі перетворення Коксетера дія як поворот на 30 градусів. А у внутрішньому просторі — поворот на 210 градусів.

Ми використовуємо розширення раціональних чисел $\mathbb{Q}$ за допомогою $\sqrt{3}$ та уявної одиниці I.

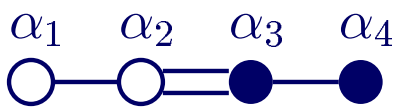
Перетворення $(\,\cdot\,)'$, що пов'язує фізичний та внутрішній простори, визначається одночасним спряженням $\sqrt{3}$ та I.

Коренева система типу F_4

Алгебра F_4 має 48 ненульових коренів.
У ортонормованому базисі (ε-базис) простору $\mathbb{R}^4$ вони мають вигляд:

$$\pm\varepsilon_i \quad (1 \le i \le 4), \qquad \tfrac{1}{2}(\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_4) \qquad \text{короткі корені}$$
$$\pm\varepsilon_i \pm \varepsilon_j \quad (1 \le i < j \le 4) \qquad \text{довгі корені}$$

Діаграма Динкіна кодує прості корені:



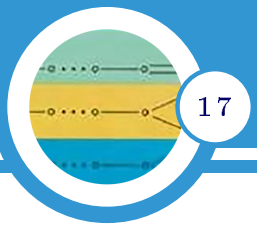
Оберемо специфічним чином набір коренів:

$$\alpha_1 = \varepsilon_2 - \varepsilon_3 = (0,1,-1,0), \quad \alpha_2 = \varepsilon_3 - \varepsilon_4 = (0,0,1,-1),$$
$$\alpha_3 = \varepsilon_4 = (0,0,0,1), \quad \alpha_4 = \tfrac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4) = \tfrac{1}{2}(1,-1,-1,-1).$$

Коренева гратка алгебри F_4,

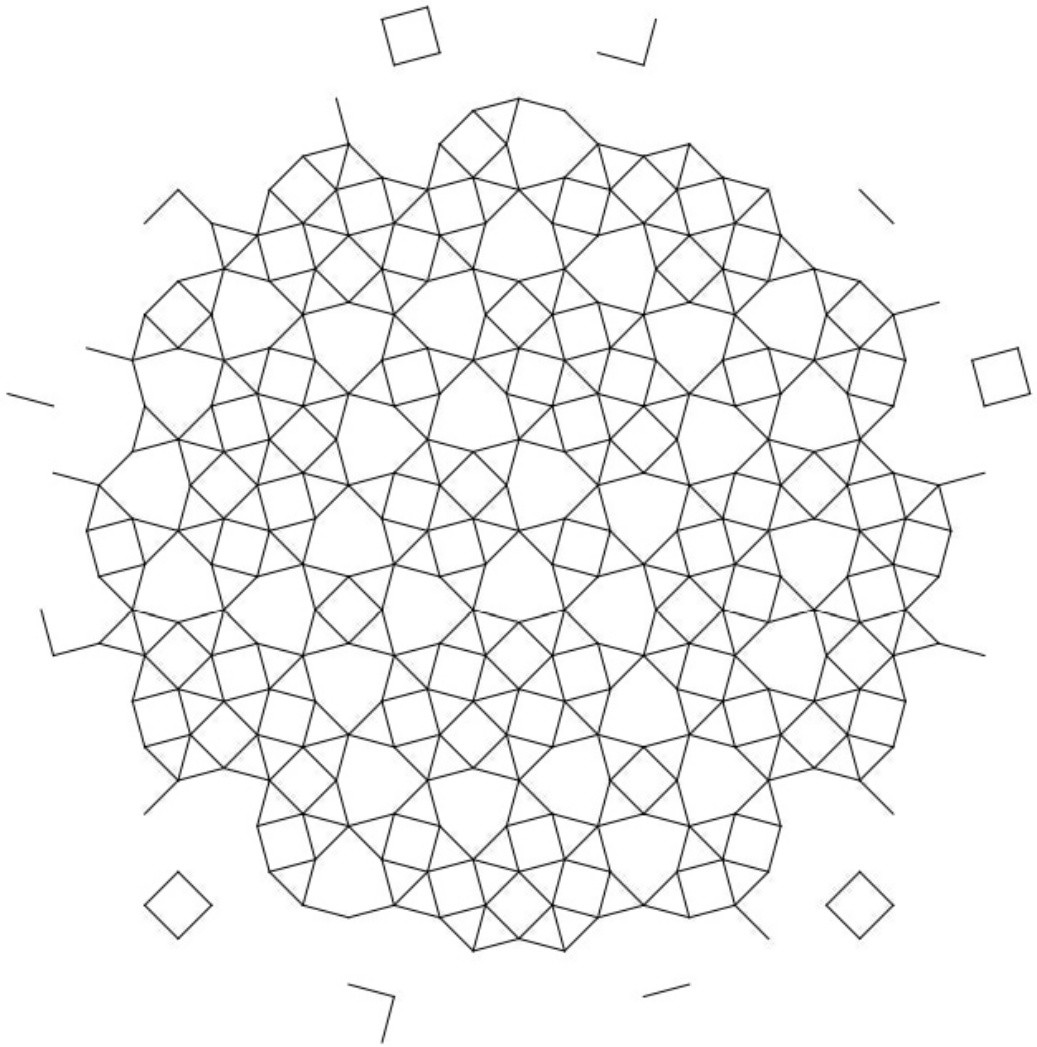
$$\mathrm{Q} = \mathbb{Z}\alpha_1 + \mathbb{Z}\alpha_2 + \mathbb{Z}\alpha_3 + \mathbb{Z}\alpha_4$$

Побудова гратки

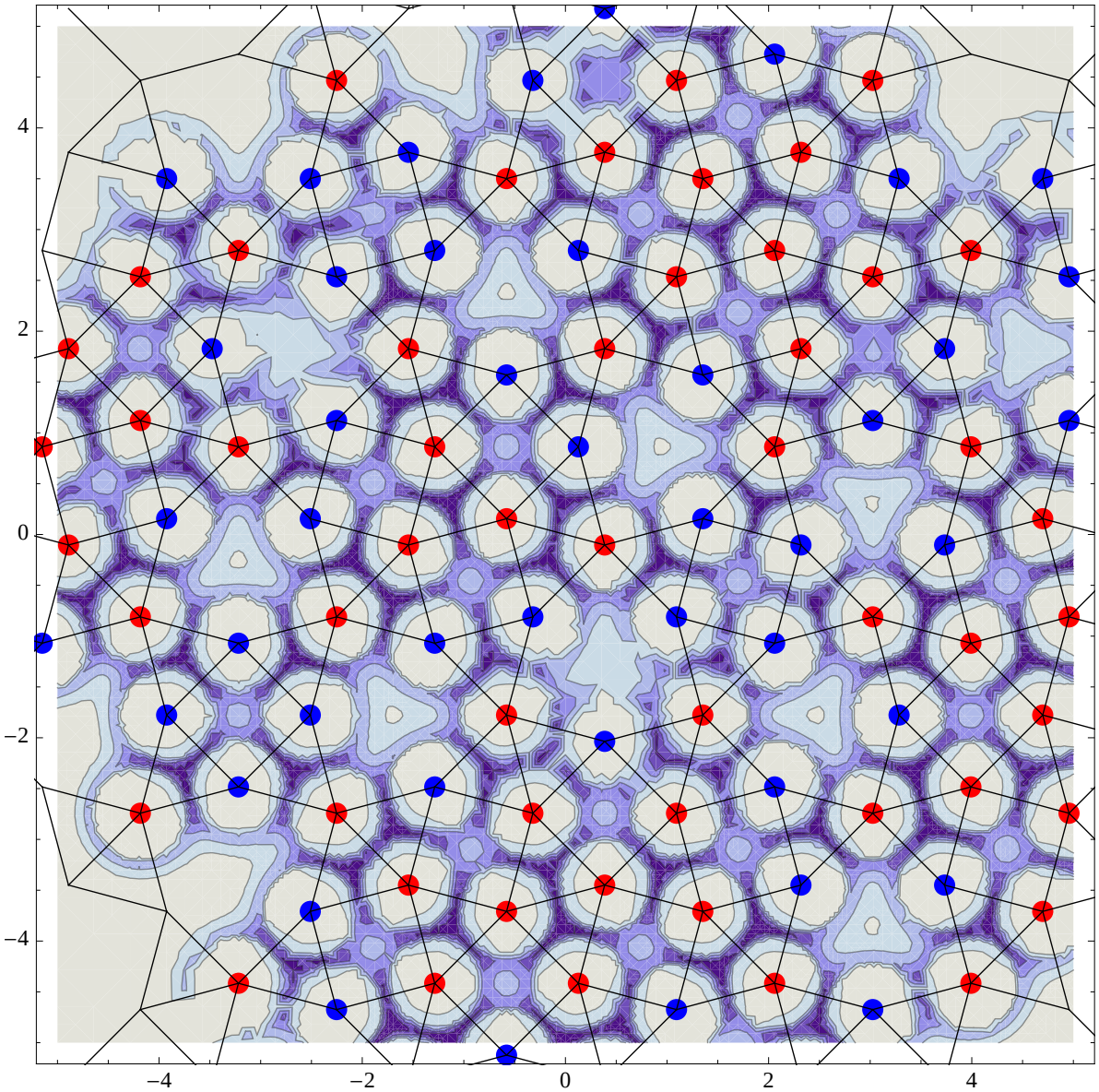


У чотиривимірному просторі прості корені породжують всю групу Вейля. Більшість групи не зберігається при проекції, але пари $r_1 r_3$ та $r_2 r_4$ зберігаються та породжують два дзеркальних відображення R_1 та R_2 у двовимірному просторі (у обох!).
Для побудови гратки ми генеруємо прямокутну частину у 4-вимірній F_4-гратці (цілі координати) та розмножуємо симетрією.
У якості вікна обираємо правильний 12-кутник навколо початку координат, описаний навколо коротких спроектованих коренів алгебри F_4.

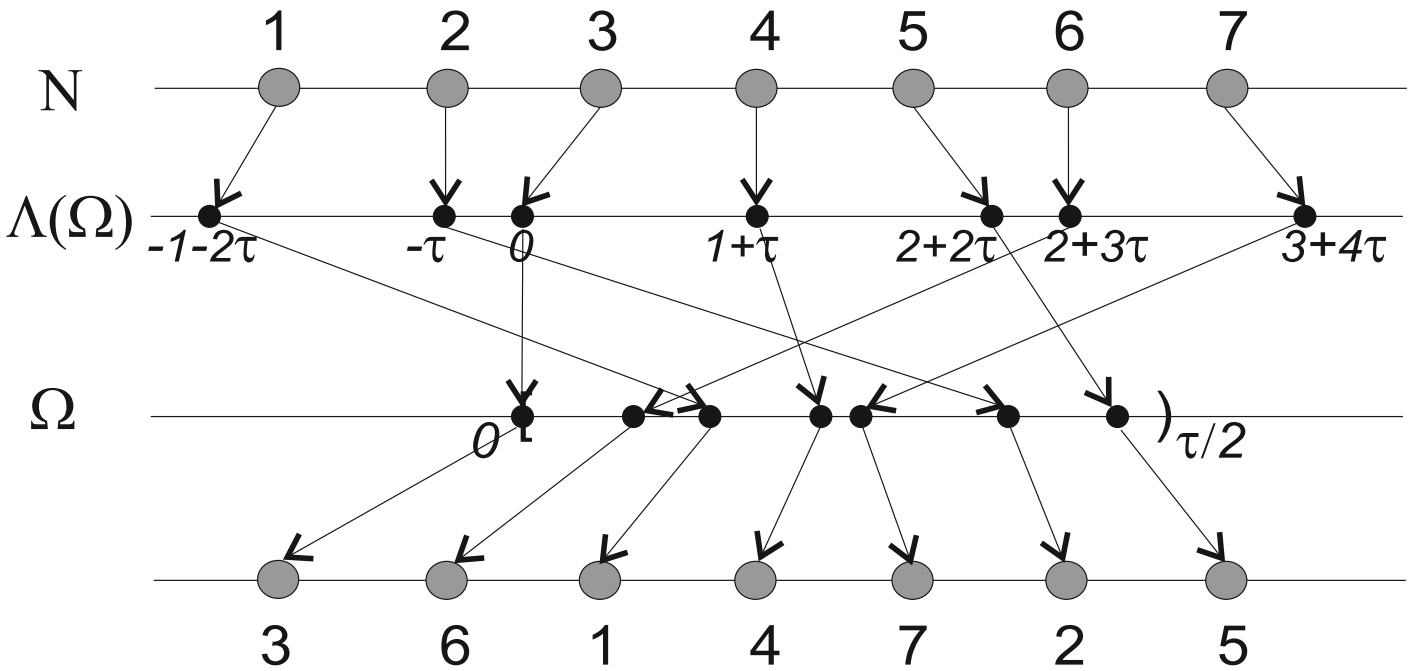
Щитовий квазікристал побудований як модельна множина



Потенціал (аналог піків Брегга)



Застосування до кодування зображень

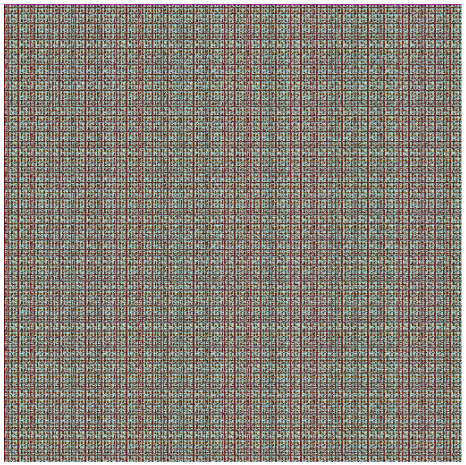


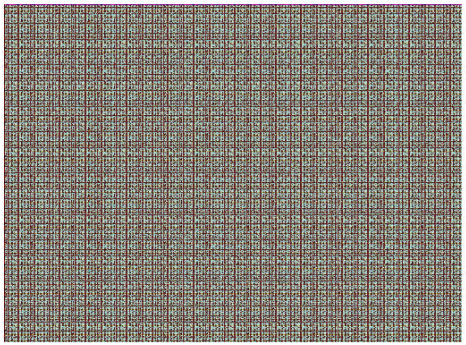
Приклад

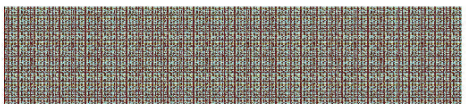




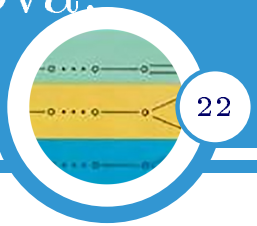












Theorem

Нехай Ω — напівзамкнений інтервал. Для кожного $\Lambda_\tau(\Omega)$ існують додатні числа $\Delta_1, \Delta_2 \in \mathbb{Z}[\tau]$ такі, що відстані між сусідніми точками в $\Lambda_\tau(\Omega)$ набувають значень із $\{\Delta_1, \Delta_2, \Delta_1 + \Delta_2\}$. Відстані залежать лише від τ, τ' та довжини вікна прийняття.

Про відстані між сусідніми точками можна сказати більше, а саме:

$$\{x_{n+1} - x_n | n \in \mathbb{Z}\} = \begin{cases} \{\Delta_1,\ \Delta_2,\ \Delta_1 + \Delta_2\}, \\ \text{коли} \quad \Delta_1^\star - \Delta_2^\star > |\Omega| \\ \{\Delta_1,\ \Delta_2\}, \\ \text{коли} \quad \Delta_1^\star - \Delta_2^\star = |\Omega|. \end{cases}$$

Приклад 1

Візьмемо $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$, $\tau' = \frac{1-\sqrt{5}}{2}$ — два корені квадратного рівняння $x^2 = x + 1$. Тоді $\tau + \tau' = 1$, $\tau\tau' = -1$. Нехай $\Omega = [0, \frac{\tau}{2})$.
Відстані між сусідніми точками квазікристала $\Lambda_\tau([0, d))$ дорівнюють $\Delta_1 = \tau$, $\Delta_2 = 1 + \tau$ та $\Delta_3 = 1 + 2\tau$.

$$\{\ldots, -1-2\tau,\ -\tau,\ 0,\ 1+\tau,\ 2+2\tau,\ 2+3\tau,\ 3+4\tau, \ldots\} \leftrightarrow$$
$$\leftrightarrow \{\ldots,\ \Delta_2,\ \Delta_1,\ \Delta_2,\ \Delta_2,\ \Delta_1,\ \Delta_2,\ \ldots\};$$

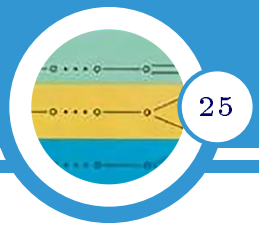
$$\{\ldots, -\tau,\ 0,\ 1+\tau,\ 2+3\tau,\ 3+4\tau, \ldots\} \leftrightarrow$$
$$\leftrightarrow \{\ldots, \Delta_1,\ \Delta_2,\ \Delta_3,\ \Delta_2, \ldots\}.$$

Приклад 2

Розглянемо ірраціональності $\tau = 1 + \sqrt{2}$, $\tau' = 1 - \sqrt{2}$ — корені квадратного рівняння $x^2 = 2x + 1$.
$\tau' \approx -0.42 \in (-1, 0)$ та $\tau \approx 2.42 > 0$. Поклавши $\Omega = [0, 1)$, отримаємо лише дві відстані $\Delta_1 = \tau$ та $\Delta_2 = 1 + \tau$ між сусідніми точками квазікристала $\Lambda_\tau([0, 1))$.
Використовуючи нульову точку як початкову (seed point), отримуємо зрізово-проєкційну множину:

$$\{\ldots, -1-3\tau, -2\tau, -\tau, 0, 1+\tau, 1+2\tau, 2+3\tau, 2+4\tau, 3+5\tau, \ldots\}$$
$$\leftrightarrow \{\ldots,\ \Delta_2,\ \Delta_1,\ \Delta_1,\ \Delta_2,\ \Delta_1,\ \Delta_2,\ \Delta_1,\ \Delta_2,\ \ldots\}.$$

Шифр Вернама



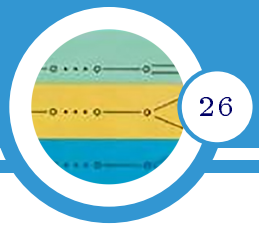
Класичний алгоритм шифрування

- Присвоїти номер кожному символу відкритого тексту та ключа відповідно до алфавітного порядку.
- Виконати побітову операцію XOR для обох чисел (відповідного номера символу відкритого тексту та номера символу ключа).
- Відняти від отриманого числа 26, якщо воно більше або дорівнює 26; якщо ні — залишити без змін.

Недоліки шифру Вернама

- Адміністрування ключів.
- Повторне використання ключа компрометує безпеку.
- Зберігання та передача ключів.
- Практичність та ефективність.
- Довжина ключа дорівнює довжині повідомлення.

Квазікристал та шифр Вернама



Модифікований алгоритм Вернама

- Представити дані у двійковій системі.
- Створити одномірний (1D) квазікристал лише з двома плиткам.
- Застосувати додавання Жегалкіна до двійкових даних і квазікристала.

Криптозмінні τ_τ'_a_b_c_d_sl_X_ε, де
τ та τ' — ірраціональні числа, кодовані через m ($x^2 = mx + 1$, $m = 1, 2, \ldots$ або $x^2 = mx - 1$, $m = 3, 4, \ldots$);

a та b — цілі числа, що фіксують початкову точку (seed point) квазікристала;

c та d — довільні дійсні числа, що фіксують положення вікна Ω;

X $\in \{`+', `-'\}$ – напрямок побудови квазікристала;

sl — послідовність перевірки відстаней між сусідніми точками (короткі, довгі);

ε — максимальна відстань від кінцевих точок Ω при перевірці точки на належність вікну.