Václav Frei

O osmnáctém Hilbertově problému

Pokroky matematiky, fyziky a astronomie, Vol. 20 (1975), No. 5, 260--268

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/138273

Hilbertovy problémy

O osmnáctém Hilbertově problému

Václav Frei, Praha

Osmnáctý problém charakterizoval Hilbert jako úlohu geometrickou a výslovně poukázal na její spojitosti s teorií čísel, krystalografií, fyzikou a chemií; souvislost úlohy s teorií grup je přímo vyjádřena její formulací ([1]). Tím se pro náš výklad nabízí několik nezávislých východisek. Z nich některé může lépe osvětlit význam úlohy pro čistou matematiku, jiné ukáže především motivaci spjatou s aplikacemi. Zvolme tento druhý přístup, který je užší, ale v daném případě zdůvodněný, a vyjděme od krystalografie.

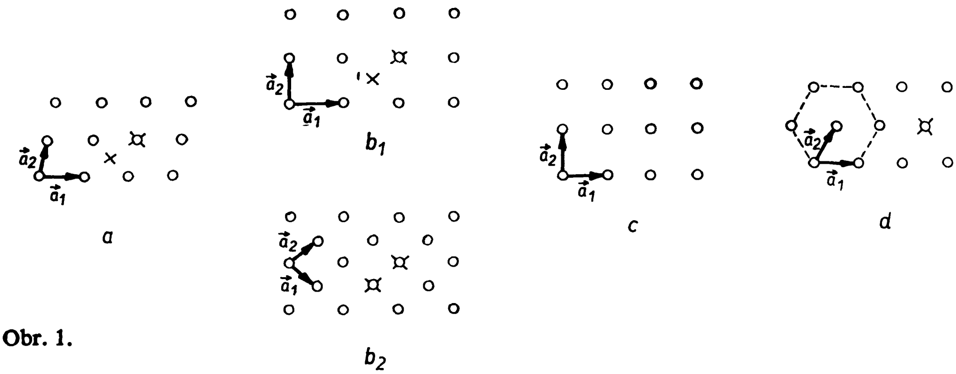
I.

Pro klasifikaci krystalů i pro studium jejich fyzikálních vlastností se ukázalo velice plodným hledisko symetrie krystalové mřížky. Budeme hovořit pouze o krystalových mřížkách *ideálních*, tj. nebudeme brát v úvahu žádné odchylky od dokonalé pravidelnosti a periodicity stavby krystalů. Pomíjíme tedy existenci hranice mřížky a její tepelný pohyb, ale i stechiometrické a geometrické poruchy, s nimiž se u každého reálného krystalu setkáváme. (Ideální mřížka je přesto i z fyzikálního hlediska zjednodušení nosné a užitečné.)

Od historického Laueho pokusu s ohybem rentgenových paprsků na krystalové mřížce (1912) byly už určeny desetitisíce struktur krystalů od kuchyňské soli až po proteiny, jejichž nejmenší stavební jednotka – základní buňka – obsahuje řádově 10^4 atomů. Tyto a všechny další myslitelné struktury lze z hlediska symetrie roztřídit do soustav (7 možností), translačních typů (14 možností), krystalografických oddělení neboli tříd (32 možností) a prostorových grup (230 možností). Např. ke známé krychlové neboli kubické soustavě příslušejí 3 translační typy, 5 oddělení a 36 prostorových grup. Je příznačné, že uvedená čísla nejsou v žádném jednoduchém vztahu a byla nalezena detailním výčtem jednotlivých možností. Nebylo by únosné rozvádět zde příslušné úvahy a odvození. Osvětleme si však – s mírnými terminologickými licencemi – zmíněné pojmy na případu dvojrozměrných krystalových mřížek*), kde jsou možné jen 4 soustavy, 5 translačních typů, 10 oddělení a 17 „prostorových" (ovšem dvojrozměrných) grup.

*) Dvojrozměrné mřížky dovolují mj. popsat symetrii dokonalých krystalových povrchů, které se nyní intenzívně studují ve fyzice i v kvantové chemii (katalýza aj.).

Je vhodné vyšetřovat nejprve „prázdnou geometrickou mřížku" – nekonečný pravidelný sled bodů v dvojrozměrném eukleidovském prostoru. Na našich obrázcích budeme uzly geometrických mřížek značit prázdnými kroužky. Obr. 1 ilustruje čtverou možnou rotační symetrii mřížek ve dvou dimenzích; možnosti *a* – *d* odpovídají 4 výše zmíněným soustavám. Rotační symetrie je vystižena tzv. ***bodovou grupou***, tj. množinou těch vlastních i nevlastních rotací kolem vhodně zvoleného pevného bodu (viz křížky na obrázcích), při nichž mřížka přechází sama v sebe. Nevlastní rotací je např. zrcadlení. Mřížku lze sestrojit posouváním výchozího bodu o celočíselné lineární kombinace dvou nej-



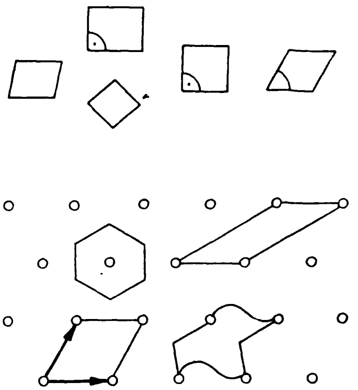
Obr. 1.

kratších základních vektorů $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, které mohou mít různou délku (*a*, b_1) nebo mohou být stejně veliké (b_2, *c*, *d*) a svírat obecný úhel (*a*, b_2), pravý úhel (b_1, *c*) nebo úhel 60° (*d*). Případy b_1 a b_2 řadíme do téže soustavy, ale k různým translačním typům, jichž je tedy skutečně 5. K 10 oddělením a 17 „prostorovým" grupám dojdeme zanedlouho.

Obr. 2.

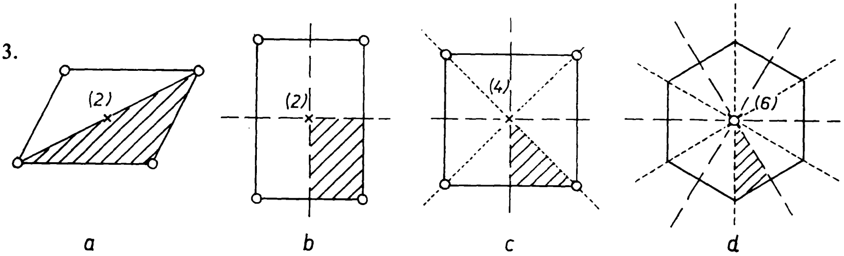
a

b



Mřížky jsou periodické, takže je můžeme charakterizovat *základní buňkou* – nejmenším útvarem, jehož posouváním (translacemi) lze celou danou mřížku vytvořit. Základní buňka je výhodná i pro popis mřížek krystalových, tj. hmotných periodických útvarů. Často se volí ve tvaru rovnoběžníku s hranami $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ (obr. *2a*), ale mřížkou je dán pouze její plošný obsah, ne tvar. Z různých možností, ilustrovaných pro hexagonální mřížku (obr. 1*d*) na obr. 2*b*, jsou např. ve fyzice užitečné dvě: rovnoběžník má nejprostší vztah k vektorům $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$; symetrická buňka má plnou rotační symetrii dané geometrické mřížky. Protáhlý rovnoběžník nemívá v aplikacích žádnou přednost. Obrazec omezený lomenými čarami a křivkami jen ukazuje volnost ve volbě tvaru základní buňky. Vzhledem k této volnosti je z geometrického hlediska nasnadě tvar základní buňky vhodně omezit, např. brát v úvahu jen vypuklé mnohoúhelníky (resp. polyedry).

Obr. 3.



Mřížky však mají též rotační symetrii, takže každou z nich lze vytvořit i z útvaru tolikrát menšího než základní buňka, kolik prvků má příslušná bodová grupa. Na obr. 3 jsme pro případy *a* až *d* z obr. 1 zvolili názorné možnosti obrazců s plošným obsahem $1/n$ základní buňky, kde n nabývá postupně hodnot 2, 4, 8 a 12. U pevného bodu vyznačeného opět křížkem je v závorce uvedena četnost rotační osy; přerušované a tečkované čáry ukazují zrcadlové roviny (nebo osy souměrnosti) příslušné mřížky.

Zbývá ještě objasnit deset oddělení a sedmnáct „prostorových" grup. Představme si, že ke každému uzlu geometrické mřížky připojíme shodnou hmotnou bázi, tj. určitou skupinu atomů (na obrázcích plné kroužky). Tak vznikne (ideální dvojrozměrná) krystalová mřížka.

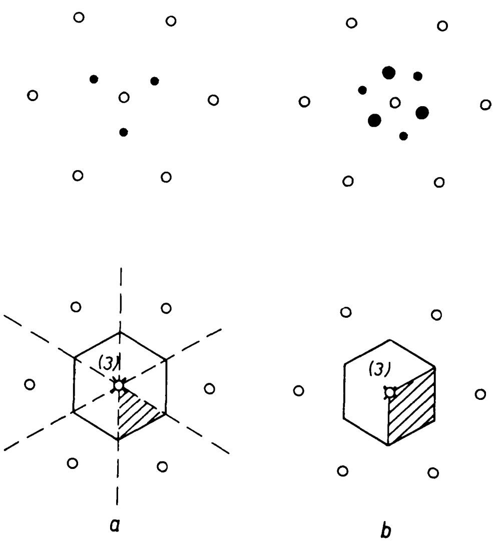
Snadno nahlédneme, že připojení hmotné báze nemůže zvýšit rotační symetrii původní geometrické mřížky, avšak může ji různými způsoby snížit. Pro hexagonální mřížku je to zčásti ilustrováno na obr. 4. Hmotná báze je kvůli přehlednosti vyznačena u jediného uzlu. Dolní náčrt vždy ukazuje rotační symetrii mřížky a takovou část základní buňky, z níž lze přípustnými rotacemi a translacemi vytvořit celou mřížku. Tyto části opět symetrii každé mřížky jednoznačně charakterizují a opět nejsou mřížkou určeny jednoznačně. Přestože musí splňovat více podmínek než základní buňky (obr. 2*b*), podařilo se např. M. C. ESCHEROVI zvolit oblast z obr. 4*b* jako obrys trpaslíka (obr. 5, [2]).

Vidíme, že rotační symetrie krystalové mřížky odvozené od určité mřížky geometrické může být popsána původní bodovou grupou i různými jejími podgrupami. Úplný výčet možností vede k počtu 10 bodových grup u dvojrozměrných krystalových mřížek a 32 bodových grup u mřížek trojrozměrných. Každé bodové grupě odpovídá krystalografické oddělení. Připojme, že počet bodových grup složených pouze z vlastních rotací (tj. z otočení v běžném smyslu) je nižší – 5 ve dvou dimenzích a 11 ve třech dimenzích. Oněch 5 bodových grup pro dvě dimenze snadno najdeme podle obr. 3, odmyslíme-li si osy souměrnosti neboli zrcadlové roviny; počet jejich prvků je 1, 2, 4 (obr. 3 *a*–*c*); 3, 6 (3*d*).

Prostorová grupa je grupa symetrie celé krystalové mřížky. Tohoto názvu užíváme v případě E_2 i E_3. Obecný prvek prostorové grupy je složen z rotace (vlastní či nevlastní) i translace.

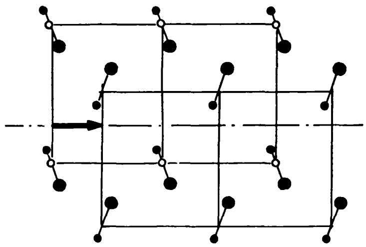
Na první pohled zaráží vysoký počet prostorových grup v trojrozměrném případě. Avšak z 230 prostorových grup jen 73 je tvořeno rotacemi a translacemi pouze o vektory

Obr. 4.



Obr. 5.

Obr. 6.



$\sum m_i \boldsymbol{a}_i$, kde m_i jsou celá čísla. To jsou tzv. *symorfní* prostorové grupy. V *nesymorfních* grupách jsou s některými rotacemi spojeny translace nemřížkové, tj. posunutí o zlomky vektorů $\boldsymbol{a}_i$. Mluvíme pak buďto o šroubových osách, připomínajících točité schody, nebo o skluzových rovinách, které mají analogii i v dvojrozměrném případě (viz obr. 6 – šipka ukazuje zlomkovou translaci). Ze 17 „prostorových" grup ve dvou dimenzích jsou nesymorfní pouze 4.

Omezíme-li se opět na ty prostorové grupy, které obsahují jen vlastní rotace, dospějeme k počtu 5 (ze 17) ve dvou dimenzích a 65 (z 230) v trojrozměrném případě. Všechny prvky těchto grup lze chápat jako reálné pohyby celé mřížky. Každé takové grupě lze přiřadit – s naznačenou volností – oblast, z níž lze vybudovat celý prostor.

II.

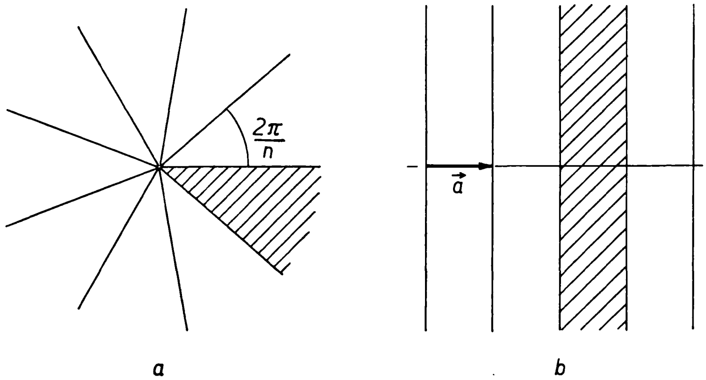
Jádro osmnáctého problému tvoří dvě otázky, k nimž je volně připojena třetí. *První* zní, zda obecně v n-rozměrném eukleidovském prostoru (E_n) existuje pouze konečný počet podstatně odlišných typů grup pohybů s fundamentální oblastí. *Za druhé* vyslovil

Hilbert otázku, zda existují (pro E_n) takové mnohostěny, jejichž shodnými exempláři lze celý prostor bez mezer vyplnit a které přitom nejsou fundamentálními oblastmi žádné grupy pohybů.

Grupou pohybů (německy Bewegungsgruppe) míní Hilbert grupu vlastních ortogonálních transformací. Dvě podmnožiny v E_n nazveme kongruentními (vzhledem k dané grupě pohybů), jestliže jedna z nich je obrazem druhé v některé transformaci grupy. *Fundamentální oblast* grupy pohybů je pak taková uzavřená oblast v E_n, že všechny exempláře s touto oblastí kongruentní právě vyplní vyšetřovaný prostor, přičemž dvě různé kongruentní oblasti nemají společné vnitřní body. V I. části jsme tedy hovořili o 5 (resp. 65) krystalografických grupách pohybů v E_2 (resp. v E_3) a např. na obr. 4 jsme uvedli dvě fundamentální oblasti.

Fundamentální oblast však může být i nekonečná, např. pro bodovou grupu (obr. 7*a*) nebo pro jednorozměrnou grupu translací v rovině o konečný vektor $\mathbf{a}$ (obr. 7*b*); podstatné je, že grupa pohybů mající fundamentální oblast je vždy diskrétní ([3]). Na druhé

Obr. 7.



straně 17 (či 230) prostorových grup vychází z obecnější třídy transformací, než jsou „pohyby" – Hilbert je nazývá Decktransformationen (na rozdíl od Bewegungen).

Zúžení problému na vlastní transformace lze z hlediska geometrie pokládat za podružné. Porovnání obr. 3*a*–*c* s obr. 4 ukazuje, že fundamentální oblasti by díky zrcadlením měly analogon polovičního plošného obsahu (resp. polovičního objemu). Z hlediska krystalografie se však neprojeví jev zvaný enantiomorfie („vzájemnotvarost"), fyzikálně významný např. pro stáčení polarizační roviny světla procházejícího krystalem (levotočivá a pravotočivá optická aktivita). Mezi 230 prostorovými grupami je 11 párů vzájemně enantiomorfních.

Nicméně krystalografie dovoluje pochopit pro E_2 a E_3 smysl první z Hilbertových otázek. Druhá otázka má smysl pouze s prostorovými grupami zobecněnými pro E_n. Z krystalografického východiska je nasnadě i *třetí otázka* o maximálním zaplnění prostoru stejnými koulemi, popř. jinými danými tělesy, která se navzájem dotýkají.

Zmiňme se ještě aspoň pro zajímavost o některých matematických souvislostech. Hilbert uvádí osmnáctý problém zjištěním, že pro plochu Riemannovu (eliptickou) existuje konečný počet různých grup pohybů a k zaplnění celého prostoru stačí vždy konečný počet exemplářů kongruentních s příslušnou fundamentální oblastí. Ploše

Lobačevského (hyperbolické) odpovídá nekonečný počet grup i potřebných exemplářů fundamentálních oblastí odpovídajících každé z nich. Prostor E_2 má jakési střední postavení, neboť počet grup je konečný (totiž 5), počet exemplářů nekonečný. Totéž bylo už v 19. století dokázáno pro trojrozměrné prostory všech tří typů; k E_3 Hilbert cituje známé krystalografické práce FJODOROVOVY (1890) a SCHÖNFLIESOVY (1891). Zobecnění pro $n > 3$ je kupodivu bezprostřední jen v případě prostorů Riemannových a Lobačevského, nikoli pro eukleidovské prostory. Odtud první Hilbertova otázka.

III.

Obě hlavní Hilbertovy otázky byly už zodpověděny ([4]). Podstatným krokem při řešení první z nich byl poznatek, že jestliže každá grupa pohybů v E_n s konečnou fundamentální oblastí obsahuje podgrupu n-rozměrných diskrétních translací, pak počet různých (zobecněných) prostorových grup pro E_n je konečný (G. FROBENIUS 1911). Přítomnost translační podgrupy pro E_2 je triviální, pro E_3 je příslušný důkaz podaný Schönfliesem (1891) i ZASSENHAUSEM (1948) dosti pracný. L. BIEBERBACH však ve třech pracích (1910–12) zobecnil Schönfliesův důkaz pro $n > 3$. Tím rozhodl kladně první Hilbertovu otázku. Tento vývoj mj. ukazuje vhodnost krystalografického východiska našeho výkladu. Poznamenejme ještě, že translační podgrupa je též podstatná pro teorii reprezentací prostorových grup v E_3 (F. SEITZ 1936), a tím i pro kvantovou teorii pevných látek (viz např. BLOCHŮV teorém, 1928).

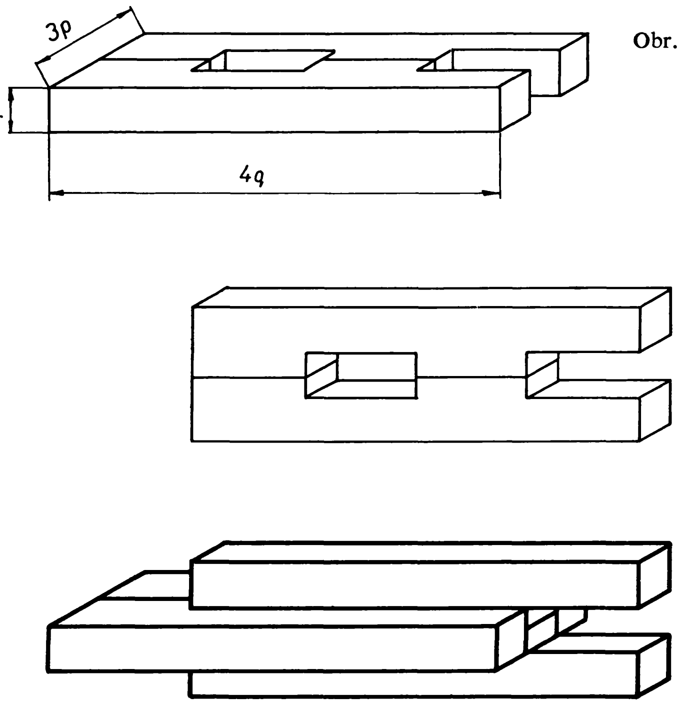
Pro každý prostor E_n tedy existuje pouze konečný počet zobecněných prostorových grup, a tím i konečný počet typů*) takových rozdělení celého prostoru E_n na shodné polyedry, že při každém rozdělení libovolný polyedr přechází v jiný některou operací té grupy, jejíž fundamentální oblast tvoří. Nelze však celý prostor E_n vyplnit shodnými exempláři určitého polyedru i tak, že pohyby převádějící jeden exemplář v druhý netvoří grupu? To je druhá Hilbertova otázka.

Ke kladné odpovědi pro $n \geqq 3$ dospěl K. REINHARDT ([5]). Našel nejprve pro E_3 příklad takového „vyplňujícího" mnohostěnu, který není fundamentální oblastí žádné grupy pohybů, a dále ukázal, že tuto vlastnost lze snadno přenést z $(n - 1)$-rozměrného polyedru na n-rozměrný.

Základní Reinhardtovu myšlenku ukazuje obr. 8 na dvojici mnohostěnů připomínajících písmeno A a zasunutých do sebe. Na obr. 8a, b je každý z obou mnohostěnů ukázán zvlášť. Dvojicemi (8c) lze zřejmě beze zbytku vyplnit E_3. Označme nyní symbolem x operaci, která první exemplář mnohostěnu ve dvojici převádí v druhý (je to otočení o 90° kolem podélné osy a posunutí o q ve směru této osy). Operací x^2 by už vznikl exemplář, který nepatří do daného souboru vyplňujícího E_3, takže x nevyhovuje axiómům grupy. Uvedený mnohostěn je „negrupový" díky tomu, že není jednoduše souvislý, a to je možné v E_n pro $n \geqq 3$. Celý Reinhardtův postup je proto platný pro $n \geqq 3$. Výchozí mnohostěn, který vede k „negrupovému" vyplnění E_3, může však být i jednoduše souvislý – např. těleso tvaru „F" na obr. 8 (polovina původního).

*) Vzhledem k nejednoznačnosti tvaru fundamentální oblasti zde „typem" rozdělení prostoru míníme souhrn všech rozdělení přiřaditelných jedné grupě. Viz ještě V. část.

Třetí otázku vyslovil Hilbert na okraj druhé a sotva ji lze zodpovědět vyčerpávajícím způsobem. Pokud jde o koule v E_n, lze snadno zjistit, že prostor E_2 v maximální míře vyplňují stejné kruhy se středy v uzlech hexagonální rovinné mřížky, a to z 90,7%, a stejné koule v obdobných vrstvách vyplňují E_3 ze 74,0%. S rostoucím n koeficient

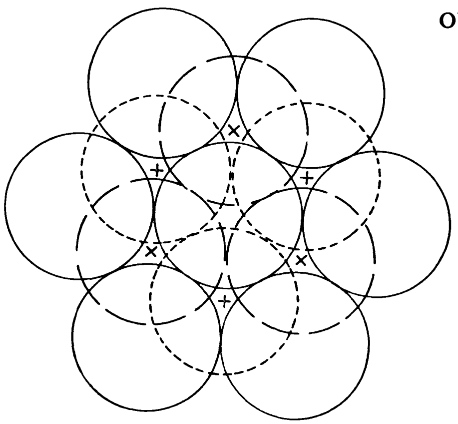


Obr. 8.

a

b

c



Obr. 9.

zaplnění dále klesá a činí 0,617 pro $n = 4$ a 0,465 pro $n = 5$ ([3]). Nejtěsnější uspořádání je v E_2 jednoznačné, v E_3 mohou k sobě sousední vrstvy koulí přiléhat dvojím způsobem (obr. 9). Pro zajímavost ještě uveďme, že se zkoumala i otázka nejřidšího uspořádání stejných koulí v E_3 (tak, aby se dotýkaly a vystupovaly rovnoprávně); H. HEESCH a F. LAVES nalezli řešení s koeficientem zaplnění 0,123 ([3]).

Otázku neúplného vyplnění prostoru stejnými danými polyedry Hilbert ve své přednášce blíže nespecifikoval.

IV.

K našemu výkladu patří ještě alespoň pár slov o vývoji v dané oblasti po r. 1900. Zmínky, které uvedeme, si jistě nemohou činit nárok na úplnost a vyvážený výběr, přece však něco naznačují o další historii osmnáctého problému.

Poměrně nedávno se podařilo vyjasnit některé otázky přímo navazující na Hilbertovy podněty. Tak B. N. DELAUNAY (1961) zčásti vyřešil otázku, jaké vypuklé polyedry mohou být fundamentálními oblastmi prostorových grup v E_n ([4]). Dokázal, že mají-li se n-rozměrné vypuklé polyedry dotýkat (n-1)-rozměrnými stěnami, je jich pro každé n pouze konečný počet topologicky různých typů. B. N. Delaunay a N. N. SANDIKOVA (1961) nalezli také algoritmus, podle něhož lze pro dané n všechny takové typy rozdělení celého E_n nalézt.

V krystalografii bylo novým momentem vyšetřování tzv. černobílých grup (A. V. ŠUBNIKOV v r. 1951 a lavina dalších*). Dvojí „barva“ každého atomu v mřížce znamená fyzikálně nejčastěji dvojí orientaci kvantovaného magnetického momentu. Novým diskrétním stupněm volnosti v mřížce vzrostl ovšem počet možností: místo 230 „fjodorovských“ prostorových grup v E_3 dostáváme 1651 „šubnikovských“ grup (A. M. ZAMORZAJEV 1953). Další autoři zavedli „polychromatické" grupy. LOEB ([2]) bere v úvahu až 12 možných hodnot. Výčet příslušných prostorových grup neprovádí, nýbrž klade důraz na odpovídající algoritmy (s výslovným odvoláním na samočinné počítače).

Nový přístup ke starému problému uvádí např. Loeb, když odvozuje 5 bodových a 17 „prostorových“ grup v E_2 řešením jisté diofantické rovnice ([2]).

V.

Osmnáctý Hilbertův problém nepatří patrně k otázkám mimořádně plodným pro samotnou matematiku. Zato se v něm ukazuje Hilbertův smysl pro význam aplikací. Ovšem u takových problémů, které jsou cenné více díky aplikacím než pro své místo v rozvoji matematiky, mnoho záleží na vývoji oborů aplikace. To jsme se už pokusili sledovat z hlediska krystalografie a fyziky pevných látek. Snad zbývá něco dodat o navazování na Hilbertovy myšlenky.

Není zvláštní a patrně ani škodlivé, objeví-li se ve fyzikální literatuře znovu některý jednoduchý pojem v matematice už zavedený, např. fundamentální oblast prostorové grupy ([7]). Je však málo povzbudivé, že lze tak zřídka najít přímé stopy Hilbertovy práce

*) Základní myšlenku černobílých grup vyslovil už v r. 1929 H. HEESCH; práce zapadla bez většího ohlasu patrně proto, že ještě nebyla známa žádná fyzikální aplikace ([6]).

v současných pramenech výrazně matematicky orientovaných*). Nejde mi tu tolik o pietní vztah k zásluhám minulých generací jako o věcnou návaznost na výsledky a metody. V učebnicích fyziky pevných látek se např. uvádějí nejtěsněji uspořádané struktury s koeficientem zaplnění 74,0% (srov. III. část), velmi důležité u prvků, ale nebývá proveden, naznačen ani citován důkaz (viz např. [3]), že vyšší koeficient zaplnění není možný. Vidím v tom minus z hlediska metodické přípravy studentů.

Někdy mezní obory povahou svých problémů lákají zainteresované specialisty, aby počali studovat pole pro ně nové, jindy je spíše odrazují. Tento druhý účinek má např. odvozování počtů krystalografických možností: 5, 17; 32, 230; 112, 1651 ... Fyzik zpravidla s úlevou vezme na vědomí, že odvození a důkazy už kdosi provedl. Ani matematiky asi neláká úplná enumerace ještě rozvětvenějších možností. (Jak dalece je slibné hledání jednoduchých nových přístupů na způsob Loebovy diofantické rovnice, netroufám si posoudit.)

Ale někdy další pokrok vyžaduje překonávání takovýchto bariér. Přínosem může být už porovnání výsledků, které byly získány v různých oborech (a zpravidla v různých dobách) a nebyly už dávno vzájemně konfrontovány. (Nepravděpodobný příklad: učebnice uvádějí „nejřidší" známou strukturu prvků – diamantovou, s koeficientem zaplnění 0,340; není však i fyzikálně možná struktura, jíž odpovídá citovaná hodnota 0,123?) Více lze čekat od součinnosti v přístupech a metodách. Koule byla dlouho úspěšným modelem atomů v anorganických krystalech. Ale tvar makromolekul může být bližší útvarům z obr. 8 nebo i 5. Pak by měl geometr důvod opustit tak přirozené, elegantní a k jednoznačnosti vedoucí pojetí tvaru fundamentální oblasti z obr. 4. A fyzik vyrostlý v klasických krystalografických představách by nemusil vidět v tělesech podle obr. 8 jen polohříčku duševní gymnastiky geometrů.

Uvedl jsem příklad, který se nabízí nad jedním aspektem uvedené problematiky. Podaří-li se udělat další krok právě v tomto bodě, nelze předem říci. Ale jsem přesvědčen, že žádná ze tří Hilbertových otázek, o nichž zde byla řeč, nepatří uzavřené minulosti.

Literatura

[1] *Problemy Gil'berta* (sborník), Moskva 1969.

[2] A. L. Loeb, *Color and Symmetry*, J. Wiley 1971.

[3] D. Hilbert a S. Cohn-Vossen, *Anschauliche Geometrie*, Springer, Berlin 1932.

[4] B. N. Delone ve sborníku (1), str. 200.

[5] K. Reinhardt, Sitzb. preuss. Akad. Wiss., 1928, 150—155.

[6] C. J. Bradley a A. P. Cracknell, *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*, Clarendon Press, Oxford 1972.

[7] V. Frei, Czech. J. Phys. *B 17* (1967), 233.

[8] Ch. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (4. vyd.), J. Wiley 1971.

*) Loeb ([2]) se na Hilberta neodvolává vůbec, Bradley a Cracknell ([6]) citují pouze práci [3] v angl. překladu z r. 1952 — stejně jako Kittel ([8]).