

NICOLAE COTFAS

MODELE MATEMATICE
PENTRU CRISTALE
ȘI CUASICRISTALE

EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI

<https://biblioteca-digitala.ro> / <https://unibuc.ro>



BIBLIOTECA CENTRALĂ
UNIVERSITARĂ
București

Cota

471824

Inventar

C199905205

NICOLAE COTFAS

**MODELE MATEMATICE
PENTRU CRISTALE
ȘI CUASICRISTALE**

**EDITURA UNIVERSITĂȚII DIN BUCUREȘTI
1999**

Referenți științifici: Prof. dr. STELIAN TURBATU
Conf. dr. ION ARMEANU

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITĂȚII

BUCUREȘTI

OTA

III 44824

B.C.U. București



C199905205

© Editura Universității din București

Șos. Panduri, 90-92, București - 76235; Telefon/Fax 410.23.84

Descrierea CIP a Bibliotecii Naționale

COTFAS, NICOLAE

Modele matematice pentru cristale și cuasicristale /

Nicolae Cotfas

București: Editura Universității din București, 1999

140 p.; 23 cm.,

Bibliogr.

ISBN 973-575-370-7

519.86:548(075.8)

Cuprins

Introducere	3
1 Cristale matematice	5
1.1 Mulțimi Delaunay	5
1.2 Metoda proiecției benzii	6
1.3 Cristale generalizate	8
2 Mulțimi model și cuasicristale	11
2.1 Scheme de proiecție	11
2.2 Mulțimi model	12
2.3 Cuasicristale	13
3 Autosimilarități ale unei mulțimi Delaunay	15
3.1 Autosimilarități ale unei mulțimi	15
3.2 Autosimilarități ale unei mulțimi model	17
3.3 Autosimilarități ale diagramei de difracție	20
4 G-sisteme de puncte	23
4.1 Orbite. G -sisteme de puncte	23
4.2 Reprezentări ale unor grupuri finite	24
4.2.1 Grupul ciclic $n \equiv C_n$	24
4.2.2 Grupul diedral D_n	24
4.2.3 Grupul complet al tetraedrului $T_d = \bar{4}3m$	25
4.2.4 Grupul tetraedrului $T = 23$	25
4.2.5 Grupul complet al octaedrului $O_h = m\bar{3}m$	26
4.2.6 Grupul icosaedrului $Y = 235$	26
4.3 Exemple de G -sisteme de puncte	27
4.4 Șiruri de G -sisteme de puncte	29
4.5 \mathbb{Z} -modulul generat de un G -sistem	31
5 Reprezentări definite de G-sisteme de puncte	33
5.1 Reprezentarea definită de un G -sistem de puncte	33
5.2 G -rețele	34
5.3 O descompunere canonică	36

5.4	O clasă de subspații G -invariante	40
6	Cristale periodice și cuasicristale	43
6.1	Cristale periodice și cuasicristale	43
6.2	Autosimilarități ale cuasicristalelor	49
6.3	Metoda suprafețelor atomice	50
7	Cuasicristale definite de G-sisteme de puncte	53
7.1	Cuasicristale definite de $D_8(1, 0)$	53
7.2	Cuasicristale definite de $D_{12}(1, 0)$	57
7.3	Cuasicristale definite de $Y(1, 0, \tau)$	60
7.4	Cuasicristale definite de $Y(1 + \tau, 1 + \tau, 1 + \tau)$	65
7.5	Cuasicristale definite de $D_4\{(1, 0), (2^{1/2}, 1)\}$	68
7.6	Alte cuasicristale	73
8	Cristale definite de G-sisteme de puncte	75
8.1	Cristale definite de $D_6(1, 0)$	75
8.2	Cristale definite de $O_h(1, 1, 0)$	77
8.3	Cristale definite de $O_h\{(1, 0, 0), (\zeta, 0, 0)\}$	79
8.4	Un cristal definit de $T_d(-1/2, 1/2, 1/2)$	81
9	Șiruri de cristale și cuasicristale	85
9.1	Limita unui șir convergent	85
9.2	Câteva șiruri convergente	86
9.3	Deformarea continuă unui cristal	89
10	Scheme de proiecție	91
10.1	Schema de proiecție definită de $D_{10}(1, 0)$	93
11	Cristale cu doi atomi în celula elementară	97
11.1	Un model matematic	97
11.2	Generatori și relații	101
11.3	Cristale privite ca varietăți discrete	106
11.4	Spații fibrat. Secțiuni	109
11.5	Integrale pe traiectorii	112
11.6	Amplitudini de tranziție	114
12	Cristale cu structura diamantului	119
12.1	Structura diamantului	119
12.2	Nivele de energie	123
12.3	Spectrul fononic	125

Introducere

Descoperirea structurilor incomensurabile, dar mai ales descoperirea în 1984 a cuasicristalelor a arătat că structurile atomice periodice nu sunt singurele structuri atomice ordonate posibile și a dus la lărgirea conceptului de cristal. Conform definiției adoptate în 1992 de către Uniunea Internațională de Cristalografie

“... by **crystal** we mean any solid having an essentially discrete diffraction diagram, and by **aperiodic crystal** we mean any crystal in which three-dimensional lattice periodicity can be considered to be absent.”

Această nouă viziune asupra stării solide a materiei a stimulat cercetările teoretice privind elaborarea unor noi modele matematice capabile să descrie cuasicristalele și tranzițiile de fază periodic-cuasiperiodic. Printre numeroasele modele care descriu structuri ordonate aperiodice un rol dominant îl au cele bazate pe metoda proiecției benzii. O variantă perfecționată a acestei metode a fost elaborată de către autor în colaborare cu Jean-Louis Verger-Gaugry [C05, Ver4, C07, C10] în 1995-96 în cadrul unei cercetări desfășurate la Institutul Național Politehnic din Grenoble. Ea se bazează pe rezultate ale teoriei reprezentării grupurilor finite și oferă posibilitatea construirii de modele matematice ale unui cuasicristal plecând de la structura sa locală descrisă cu ajutorul orbitelor grupului de simetrie a diagramei lui de difracție. Metoda permite nu numai o descriere fină a structurii cuasicristalelor ci și o bună descriere a transformărilor de fază bazată pe deformarea reuniunii de orbite utilizată pentru descrierea structurii locale. Mai mult, ea oferă o descriere unitară a cristalelor periodice și a cuasicristalelor. Unele facilități ce pot fi obținute prin utilizarea acestei metode în descrierea cristalelor periodice sunt prezentate în ultimele capitole ale cărții.

Rolul fundamental jucat de grupul de simetrie în cazul cristalelor periodice este preluat în cazul cuasicristalelor de anumite transformări care lasă invariantă mulțimea pozițiilor atomilor numite autosimilarități. Până de curând, astfel de autosimilarități erau cunoscute doar în unele cazuri particulare. Astfel se știa că pavajul Penrose tridimensional, unul dintre cele mai cunoscute modele, este invariant față de omotetiile $\mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3 : x \mapsto [(1+\sqrt{5})/2]^{3n}$, oricare ar fi $n \in \mathbb{N}$. Recent, autorul a arătat că există o infinitate de alte omotetii care lasă pavajul Penrose invariant, și a elaborat o metodă de studiere sistematică a autosimilarităților în cazul modelelor obținute prin metoda proiecției benzii [C08, C09, C10].

Studiul cuasicristalelor în cei 15 ani care au trecut de la descoperirea lor s-a bucurat de o largă atenție concretizată în numeroase conferințe și elaborarea unui număr impresionant de articole. Interesante rezultate au fost obținute și în țara noastră de grupul de cercetare condus de doamna acad. Rodica Mănăilă.

Sperăm că această carte conținând metode matematice utilizate în studiul cuasicristalelor să umple un gol existent în literatura de fizică din țara noastră și să stimuleze preocupările tinerilor cercetători față de acest nou și fascinant capitol al fizicii cristalelor. Ea se adresează studenților de la grupele de fizică teoretică precum și studenților de la facultățile de matematică și chimie interesați de metodele matematice utilizate în fizica cristalelor.

Capitolul 1

Cristale matematice

În primele două capitole ale cărții vom prezenta într-o formă concisă unele definiții și rezultate matematice cu scopul de a oferi cititorului o imagine mai largă asupra metodelor matematice utilizate în descrierea cristalelor. Doar o parte dintre aceste noțiuni și rezultate vor fi utilizate pe parcursul cărții.

1.1 Mulțimi Delaunay

Fie $\mathbb{E}_n = (\mathbb{R}^n, \langle, \rangle)$ spațiul euclidian n -dimensional înzestrat cu produsul scalar standard

$$\langle x, y \rangle = \sum_{j=1}^n x_j y_j.$$

Pentru $a \in \mathbb{E}_n$, $A, B \subset \mathbb{E}_n$ utilizăm notațiile

$$a \pm B = \{a \pm x \mid x \in B\}$$

$$A \pm B = \{x \pm y \mid x \in A, y \in B\}$$

$$\mathbb{Z}a = \{\alpha a \mid \alpha \in \mathbb{Z}\} \quad \mathbb{R}a = \{\alpha a \mid \alpha \in \mathbb{R}\}.$$

Definiție: Spunem că mulțimea $A \subset \mathbb{E}_n$ este *relativ densă* în \mathbb{E}_n dacă există o mulțime compactă $K \subset \mathbb{E}_n$ astfel încât $A + K = \mathbb{E}_n$.

Definiție: O mulțime $A \subset \mathbb{E}_n$ se numește *uniform discretă* dacă există o vecinătate deschisă U a lui 0 în \mathbb{E}_n astfel încât $(A - A) \cap U = \{0\}$.

Mulțimea $A \subset \mathbb{E}_n$ este *uniform discretă* dacă și numai dacă există $\epsilon > 0$ astfel încât distanța între oricare două puncte ale lui A să fie mai mare decât ϵ .

Definiție: O submulțime a lui \mathbb{E}_n care este în același timp *uniform discretă* și *relativ densă* se numește *mulțime Delaunay*.

Definiție: O submulțime $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_n$ este numită *rețea* dacă există o bază $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ a lui \mathbb{E}_n astfel încât \mathcal{L} coincide cu subgrupul aditiv generat de $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, adică,

$$\mathcal{L} = \sum_{j=1}^n \mathbb{Z}v_j.$$

Orice rețea este o mulțime Delaunay.

Definiție: O submulțime $\mathcal{A} \subset \mathbb{E}_n$ este numită *periodică* dacă există o rețea $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_n$ astfel încât

$$\mathcal{A} + v = \mathcal{A}$$

oricare ar fi $v \in \mathcal{L}$.

În particular, orice rețea este o mulțime periodică.

1.2 Metoda proiecției benzii

Mulțimea punctelor care reprezintă centrele de masă ale atomilor unui cristal reprezintă un fragment al unei mulțimi Delaunay. În cazul în care se neglijează efectele datorate faptului că cristallul este finit ca întindere și se analizează numai fenomenele care au loc în interiorul lui, departe de frontieră, modelul utilizat este o mulțime Delaunay. În particular, modelul matematic al unui quasicristal este o mulțime Delaunay neperiodică. Una dintre cele mai remarcabile metode utilizate pentru a obține astfel de mulțimi este metoda proiecției benzii.

Plecând de la descompunerea spațiului \mathbb{E}_k în sumă directă de subspații ortogonale

$$\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$$

și de la o rețea $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_k$ se poate considera în cazul fiecărei mulțimi mărginite $\Omega \subset \mathbb{E}_k^{\perp}$ numite *fereastră de selecție* "banda" (Fig. 1)

$$\mathcal{B} = \Omega + \mathbb{E}_k^{\parallel} = \{ x \in \mathbb{E}_k \mid \pi^{\perp}(x) \in \Omega \}$$

unde $\pi^{\perp} : \mathbb{E}_k \rightarrow \mathbb{E}_k^{\perp}$ este proiectorul ortogonal corespunzător subspațiului \mathbb{E}_k^{\perp} . Prin proiecția pe \mathbb{E}_k^{\parallel} a punctelor lui \mathcal{L} situate în banda \mathcal{B} se obține mulțimea Delaunay

$$(1.1) \quad \mathcal{Q} = \pi^{\parallel}(\mathcal{L} \cap \mathcal{B}) = \{ \pi^{\parallel}(x) \mid x \in \mathcal{L}, \pi^{\perp}(x) \in \Omega \}$$

unde $\pi^{\parallel} : \mathbb{E}_k \rightarrow \mathbb{E}_k^{\parallel}$ este proiectorul ortogonal corespunzător subspațiului \mathbb{E}_k^{\parallel} .

Metoda prezentată, numită¹ *metoda proiecției benzii*, admite o variantă echivalentă numită *metoda tăieturii* (Fig. 2). Rețeaua \mathcal{L} este decorată cu fereastra $-\Omega$ obținându-se mulțimea (Fig. 2)

¹ strip projection method în engleză

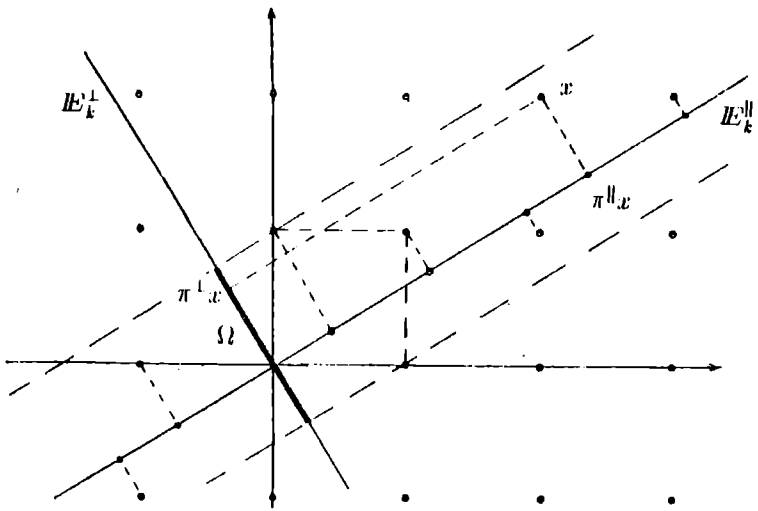


Fig. 1 Metoda proiecției benzii.

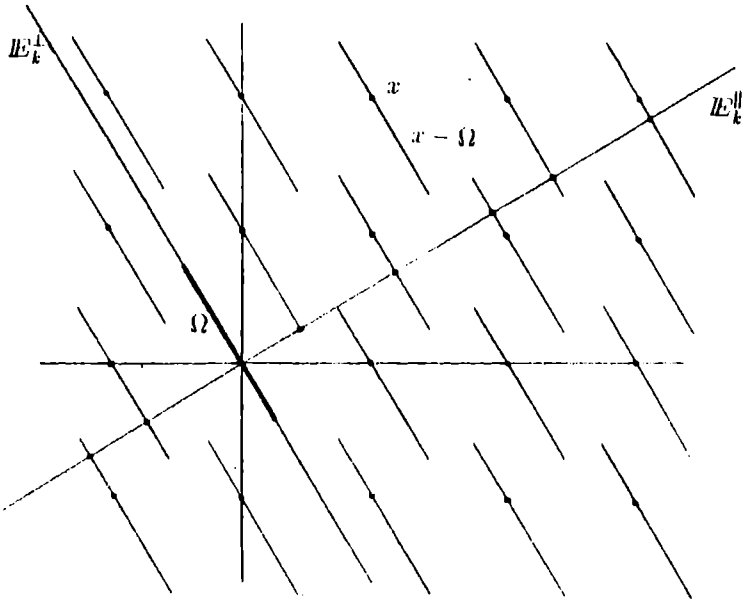


Fig. 2 Metoda intersecțiilor

$$\mathcal{L} - \Omega = \bigcup_{x \in \mathcal{L}} x - \Omega = \{ x - y \mid x \in \mathcal{L}, y \in \Omega \}.$$

care ne permite să definim mulțimea \mathcal{Q} prin relația

$$(1.2) \quad \mathcal{Q} = \mathbb{E}_k^{\parallel} \cap (\mathcal{L} - \Omega).$$

Unele generalizări și perfecționări ale acestor metode vor fi prezentate pe parcursul cărții.

1.3 Cristale generalizate

Definiție: O măsură μ pe \mathbb{R}^n este o funcțională liniară definită pe spațiul \mathcal{K} al funcțiilor continue cu suport compact $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ cu proprietatea că pentru fiecare mulțime compactă $K \subset \mathbb{R}^n$ există o constantă a_K astfel încât pentru toate funcțiile complexe mărginite cu suportul în K avem

$$|\mu(f)| \leq a_K \|f\|$$

unde

$$\|f\| = \sup_{x \in K} |f(x)|.$$

O mulțime finită $\{a_1, a_2, \dots, a_m\} \subset \mathbb{E}_n$ poate fi descrisă prin măsura

$$\mu = \sum_{j=1}^m \delta_{a_j}$$

unde $\delta_a(f) = f(a)$. Unele informații privind modul cum sunt distribuite unele față de altele punctele acestei mulțimi sunt conținute de funcția

$$I(q) = \left| \sum_{j=1}^m e^{-2\pi i q a_j} \right|^2$$

considerată ca reprezentând *figura sa de difracție*. Ea coincide cu transformata Fourier a convoluției $\mu \star \tilde{\mu}$, adică

$$I = \widehat{\mu \star \tilde{\mu}}$$

unde $\tilde{\mu}(x) = \overline{\mu(-x)}$.

Fie $\Lambda \subset \mathbb{E}_n$ o mulțime Delaunay, $\rho \in (0, \infty)$ și fie $a \in \mathbb{E}_n$. Mulțimea punctelor lui Λ care aparțin bilei $B_{r,\rho}$ de centru a și rază ρ va fi notată cu $\Lambda_{a,\rho}$. În general, pentru orice bilă B definim

$$\Lambda_B = \Lambda \cap B$$

$$\gamma_{\Lambda_B} = \frac{1}{|B|} \mu_{\Lambda_B} \star \tilde{\mu}_{\Lambda_B}$$

unde $|B|$ este volumul lui B .

Definiție: Spunem că șirul de măsuri $(\mu_j)_{j \geq 0}$ converge la măsura μ dacă

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \mu_j(f) = \mu(f)$$

oricare ar fi $f \in \mathcal{K}$.

Definiție: Se numește *autocorelație* a unei mulțimi Delaunay Λ , orice limită a unui șir de măsuri $\gamma_{\Lambda B_j}$, corespunzătoare unui șir crescător de bile B_j de centru 0 a căror reuniune este spațiul \mathbb{R}^n .

Condiții suficiente pentru existența și unicitatea autocorelației unei mulțimi Delaunay sunt prezentate în teorema următoare.

Teorema 1.3.1 (A. Hof [Hof1]) Fie Λ o mulțime Delaunay astfel încât $\Lambda - \Lambda$ să nu aibă puncte de acumulare, și fie $N_B(a)$ este numărul de posibilități de a scrie $a \in \Lambda - \Lambda$ ca diferența a două elemente din Λ_B . Dacă oricare ar fi $a \in \Lambda - \Lambda$, există limita

$$(1.3) \quad \lim_{R \rightarrow \infty} (2R)^{-n} N_{B_{0,R}}(a) = n(a)$$

atunci Λ admite o autocorelație unic determinată

$$\gamma = \sum_{a \in \Lambda - \Lambda} n(a) \delta_a.$$

Fie $S(\mathbb{R}^n)$ spațiul lui Schwartz al funcțiilor cu descreștere rapidă utilizat în definirea distribuțiilor temperate. Transformata Fourier

$$\widehat{f}(\xi) = \int f(x) e^{-2\pi i \langle \xi, x \rangle} dx$$

a unei funcții $f \in S(\mathbb{R}^n)$ aparține de asemenea lui $S(\mathbb{R}^n)$ și

$$f(x) = \int \widehat{f}(\xi) e^{2\pi i \langle x, \xi \rangle} d\xi.$$

Transformata Fourier \widehat{T} a unei distribuții temperate T

$$\widehat{\widehat{T}f} = T\widehat{f}$$

este de asemenea o distribuție temperată.

Despre o măsură μ se spune că este *pozitivă* dacă $\mu(f) \geq 0$ oricare ar fi $f \geq 0$. În cazul în care $\mu(f * \bar{f}) \geq 0$ oricare ar fi $f \in S(\mathbb{R}^n)$, spunem că măsura μ este *pozitiv definită*. Fie Λ o mulțime Delaunay admitând o unică autocorelație γ_Λ . Transformata Fourier a lui γ_Λ este numită *figură de difracție* a lui Λ . Măsura γ_Λ este pozitiv definită deoarece este limita unui șir de măsuri pozitiv definite.

Conform unei teoreme a lui Bochner rezultă că $\widehat{\gamma}_\Lambda$ este o măsură pozitivă. Ea se poate scrie în mod unic ca suma dintre o măsură discretă, o măsură singulară continuă și o măsură absolut continuă

$$\gamma_\Lambda = \widehat{\gamma}_{\Lambda_d} + \widehat{\gamma}_{\Lambda_{sc}} + \widehat{\gamma}_{\Lambda_{ac}}.$$

Se numește *măsură Bragg* a lui Λ componenta discretă $\widehat{\gamma}_{\Lambda_d}$ a lui $\widehat{\gamma}_{\Lambda}$. Ea se scrie

$$\widehat{\gamma}_{\Lambda} = \sum_{\omega \in S} \widehat{\gamma}_{\Lambda}(\{\omega\}) \delta_{\omega}$$

unde S este o mulțime cel mult numărabilă numită *spectru Bragg* al lui Λ .

Definiție: O mulțime Delaunay Λ având o unică autocorelație γ_{Λ} este numită *cristal generalizat* dacă spectrul său Bragg este infinit.

Capitolul 2

Mulțimi model și cuasicristale

2.1 Scheme de proiecție

Fie k un număr natural nenul, și fie $W \subset \mathbb{E}_k$ un subspațiu vectorial al lui \mathbb{E}_k . Structura uzuală de spațiu topologic a lui \mathbb{E}_k induce pe W o structură de spațiu topologic, și anume, $U \subset W$ este o mulțime deschisă în W dacă și numai dacă există o mulțime deschisă $\tilde{U} \subset \mathbb{E}_k$ astfel încât $U = \tilde{U} \cap W$. Este topologia lui W definită de restricția la W a distanței euclidiene

$$d : \mathbb{E}_k \times \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k \quad d((x_1, x_2, \dots, x_k), (y_1, y_2, \dots, y_k)) = \left[\sum_{j=1}^k (x_j - y_j)^2 \right]^{1/2}.$$

Dacă $\mathcal{D} \subset W$ este un subgrup al grupului $(W, +)$, atunci condițiile următoare sunt echivalente:

- (i) \mathcal{D} este discret și W/\mathcal{D} este compact.
- (ii) \mathcal{D} este o mulțime Delaunay în W .

Orice subgrup al lui W care satisface aceste condiții este rețea în W .

Dacă W^{\parallel} și W^{\perp} sunt două subspații ortogonale ale lui \mathbb{E}_k și $W = W^{\parallel} \oplus W^{\perp}$, atunci pentru fiecare $x \in W$ există $x^{\parallel} \in W^{\parallel}$ și $x^{\perp} \in W^{\perp}$ unic determinate astfel încât $x = x^{\parallel} + x^{\perp}$. Aplicațiile

$$p^{\parallel} : W \longrightarrow W : x \mapsto x^{\parallel} \quad p^{\perp} : W \longrightarrow W : x \mapsto x^{\perp}$$

sunt proiectorii ortogonali corespunzător subspațiilor W^{\parallel} și W^{\perp} , respectiv.

Definiție: Ansamblul

$$W^{\parallel} \xrightarrow{p^{\parallel}} W^{\parallel} \oplus W^{\perp} \xrightarrow{p^{\perp}} W^{\perp}$$

\cup
 \mathcal{D}

format din două subspații ortogonale W^{\parallel} , W^{\perp} și dintr-o rețea \mathcal{D} în $W = W^{\parallel} \oplus W^{\perp}$ este numit¹ *schemă de proiecție* dacă următoarele condiții sunt verificate:

- (i) restricția $p^{\parallel}|_{\mathcal{D}}$ a proiecteurului p^{\parallel} la \mathcal{D} este injectivă.
- (ii) $p^{\perp}(\mathcal{D})$ este dens în W^{\perp} .

Vom utiliza perechea $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$ pentru a desemna schema de proiecție astfel definită. În cazul $W^{\perp} = \{0\}$ schema de proiecție $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$ se numește *trivială*.

2.2 Mulțimi model

Fie $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$ o schemă de proiecție netrivială, și fie Ω o parte relativ compactă a lui W^{\perp} de interior nevid.

Definiție: Prin *mulțimea model*² definită de rețeaua \mathcal{D} și fereastra de selecție Ω se înțelege mulțimea

$$(2.1) \quad \left\{ p^{\parallel}x \mid x \in \mathcal{D}, p^{\perp}x \in \Omega \right\}.$$

Mai general, spunem că $\Lambda \subset \mathbb{E}_n$ este *mulțime model* dacă există o schemă de proiecție netrivială $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$, o mulțime relativ compactă $\Omega \subset W^{\perp}$ de interior nevid și o izometrie $\varphi : \mathbb{E}_n \rightarrow W^{\parallel}$ astfel încât

$$(2.2) \quad \varphi(\Lambda) = \left\{ p^{\parallel}x \mid x \in \mathcal{D}, p^{\perp}x \in \Omega \right\}.$$

În acest caz vom scrie

$$\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, \Omega).$$

În general, pentru o mulțime model Λ , reprezentarea $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, \Omega)$ nu este unică. Mai multe scheme de proiecție și ferestre de selecție pot defini aceeași mulțime model.

Definiție: O mulțime model Λ este numită *completă* dacă există o schemă de proiecție netrivială $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$ și o mulțime compactă $K \subset W^{\perp}$ de interior nevid astfel încât $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, K)$.

Dacă punem $\mathcal{D}^{\parallel} = p^{\parallel}(\mathcal{D})$ și desemnăm prin \diamond aplicația

$$\diamond : \mathcal{D}^{\parallel} \rightarrow W^{\perp} : x \mapsto x^{\circ} = p^{\perp} \left((p^{\parallel}|_{\mathcal{D}})^{-1}x \right)$$

atunci mulțimea model Λ definită de rețeaua \mathcal{D} și fereastra de selecție Ω este

$$\Lambda = \left\{ x \in \mathcal{D}^{\parallel} \mid x^{\circ} \in \Omega \right\}.$$

În plus,

$$\mathcal{D} = \left\{ (x, x^{\circ}) \mid x \in \mathcal{D}^{\parallel} \right\}.$$

Teorema 2.2.1 ([Bn]) *Orice mulțime model este o mulțime Delaunay.*

¹ cut and project scheme in engleză

² model set in engleză

2.3 Cuasicristale

Fie $U(1)$ grupul multiplicativ al numerelor complexe de modul 1, și fie Λ o submulțime a lui \mathbb{E}_n .

Definiție: Se numește *caracter slab* pe Λ restricția la Λ a unui morfism de grupuri $\chi : [\Lambda] \rightarrow U(1)$, unde $[\Lambda]$ este grupul aditiv generat de Λ . Prin *caracter tare* pe \mathbb{E}_n se înțelege un morfism de grupuri $\chi : \mathbb{E}_n \rightarrow U(1)$ care este continuu.

Fiecare caracter tare pe \mathbb{E}_n este de forma

$$\chi_\omega : \mathbb{E}_n \rightarrow U(1) : x \mapsto e^{2\pi i \langle \omega, x \rangle}$$

unde $\omega \in \mathbb{E}_n$. Ele formează *dualul grupului* $(\mathbb{R}^n, +)$, notat cu $\hat{\mathbb{R}}^n$,

$$\hat{\mathbb{R}}^n = \{ \chi_\omega \mid \omega \in \mathbb{E}_n \}.$$

Aplicația

$$\mathbb{E}_n \rightarrow \hat{\mathbb{R}}^n : \omega \mapsto \chi_\omega$$

este un izomorfism de grupuri care permite definirea unei structuri de spațiu topologic pe $\hat{\mathbb{R}}^n$.

Definiție: Spunem că mulțimea Λ este *armonioasă* dacă orice caracter slab $\chi : [\Lambda] \rightarrow U(1)$ poate fi aproximat uniform pe Λ prin caractere tari, adică, oricare ar fi $\epsilon > 0$, există $\omega \in \mathbb{E}_n$ astfel încât

$$|\chi(x) - e^{2\pi i \langle \omega, x \rangle}| < \epsilon$$

oricare ar fi $x \in \Lambda$.

Definiție: Mulțimea

$$\Lambda^\epsilon = \left\{ \chi_\omega \in \hat{\mathbb{R}}^n \mid |\chi_\omega(x) - 1| \leq \epsilon \text{ oricare ar fi } x \in \Lambda \right\}$$

unde $\epsilon > 0$, se numește ϵ -*dualul* lui Λ .

Definiție: Spunem că $\Lambda \subset \mathbb{E}_n$ posedă *proprietatea de aproximare liniară* dacă oricare ar fi $m \in \mathbb{N}$, $m \neq 0$, și oricare ar fi morfismul de grupuri aditive $f : [\Lambda] \rightarrow \mathbb{E}_m$ există o aplicație liniară $L : \mathbb{E}_n \rightarrow \mathbb{E}_m$ și o constantă C astfel încât

$$|f(x) - Lx| \leq C$$

oricare ar fi $x \in \Lambda$.

Teorema 2.3.1 ([Moo]) *Dacă Λ este o submulțime relativ densă în \mathbb{E}_n atunci condițiile următoare sunt echivalente:*

- (i) Λ este submulțime a unei mulțimi model.
- (ii) Λ este o mulțime armonioasă.
- (iii) Λ^ϵ este relativ densă în $\hat{\mathbb{R}}^n$ oricare ar fi $\epsilon > 0$.
- (iv) Λ^ϵ este relativ densă în $\hat{\mathbb{R}}^n$ pentru un anumit $\epsilon \in (0, 1/2)$.

(v) Există o mulțime finită $F \subset \mathbb{E}_n$ astfel încât

$$\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F.$$

(vi) $\Lambda - \Lambda$ este uniform discretă.

(vii) $[\Lambda]$ admite un sistem finit de generatori și Λ posedă proprietatea de aproximare liniară.

Definiție: Mulțimea $\Lambda \subset \mathbb{E}_n$ este numită *cuasicristal* dacă Λ este relativ densă în \mathbb{E}_n și verifică una dintre condițiile echivalente (i)-(vii).

În particular, fiecare mulțime model este un cuasicristal.

Teorema 2.3.2 ([Mey1]) Dacă $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, \Omega)$ este un cuasicristal conținut în \mathbb{E}_n , atunci orice funcție φ de clasă C^∞ cu suportul în interiorul lui Ω , măsura

$$\mu = \sum_{x \in \mathcal{D}} \varphi(x^\perp) \delta_{x^\parallel}$$

este aproape periodică, are suportul conținut în Λ și transformata sa Fourier este măsura

$$\hat{\mu} = (2\pi)^n c^{-1} \sum_{x^* \in \mathcal{D}^*} \varphi(-x^{*\perp}) \delta_{x^*\parallel}$$

unde \mathcal{D}^* este rețeaua reciprocă corespunzătoare lui \mathcal{D} și c este măsura unui domeniu fundamental al lui \mathcal{D} .

Definiție: Un cuasicristal Λ se numește *regulat* dacă există o schemă de proiecție $(W^\parallel \oplus W^\perp, \mathcal{D})$ și o mulțime compactă măsurabilă Riemann K astfel încât $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, K)$.

Teorema 2.3.3 ([Bn]) Dacă $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, K)$ este un cuasicristal regulat conținut în \mathbb{E}_n și c este măsura unui domeniu fundamental al lui \mathcal{D} , atunci Λ admite o unică autocorelație și anume

$$\gamma_\Lambda = c^{-1} \sum_{x \in \mathcal{D}} (\chi_K \star \chi_{-K})(x^\perp) \delta_{x^\parallel}.$$

Teorema 2.3.4 ([Bn]) Dacă $\Lambda = \text{mod}(\mathcal{D}, K)$ este un cuasicristal regulat în \mathbb{E}_n și c este măsura unui domeniu fundamental al lui \mathcal{D} , atunci figura de difracție a lui Λ este pur discretă și anume

$$\hat{\gamma}_\Lambda = (2\pi)^n c^{-2} \sum_{x^* \in \mathcal{D}^*} \left| \hat{\chi}_K(x^{*\perp}) \right|^2 \delta_{x^*\parallel}.$$

În particular, orice cuasicristal regulat este un cristal generalizat.

Capitolul 3

Autosimilarități ale unei mulțimi Delaunay

3.1 Autosimilarități ale unei mulțimi

Fie $\Lambda \subset \mathbb{E}_n$ o mulțime Delaunay. Anumite transformări ale lui \mathbb{E}_n care lasă invariantă mulțimea Λ au un rol important în studiul proprietăților acestei mulțimi și este de așteptat ca ele să fie utile în modelarea matematică a cuasicristalelor. Interesul față de astfel de transformări s-a amplificat continuu [Mas1, Ba2, Gaz3, Ptr, Ple, C08, C09].

Definiție: (Fig. 3) O omotetie de raport λ a lui \mathbb{E}_n

$$\mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : x \mapsto \lambda x$$

se numește¹ *autosimilaritate de constantă de inflație* λ a lui Λ dacă

$$\lambda\Lambda \subset \Lambda.$$

Definiție: (Fig. 4) O similaritate afină a lui \mathbb{E}_n

$$\mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : x \mapsto v + \lambda(x - v)$$

se numește *autosimilaritate afină* de centru v și constantă de inflație λ dacă

$$v + \lambda(\Lambda - v) \subset \Lambda.$$

Deoarece Λ este o mulțime uniform discretă și

$$\|v + \lambda(x - v) - v - \lambda(x' - v)\| = |\lambda| \|x - x'\|$$

oricare ar fi $x, x' \in \Lambda$, orice constantă de inflație a lui Λ satisface relația

$$|\lambda| \geq 1.$$

¹ *self-similarity* în engleză

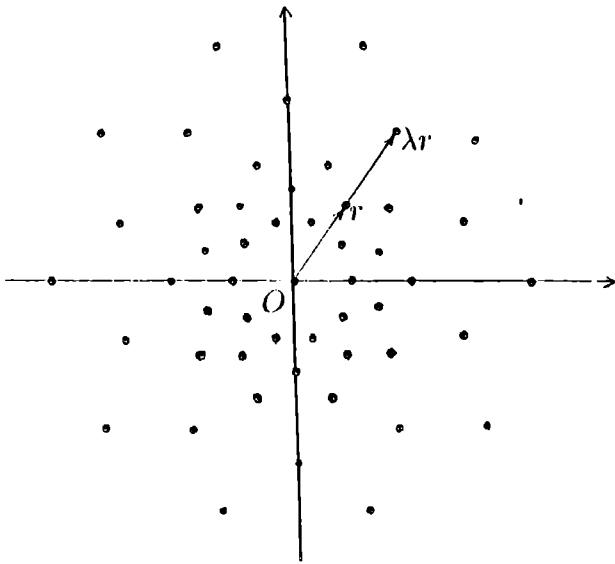


Fig. 3. Omotetia $r \mapsto \lambda r$ este o autosimilaritate a mulțimii A dacă $r \in A \Rightarrow \lambda r \in A$.

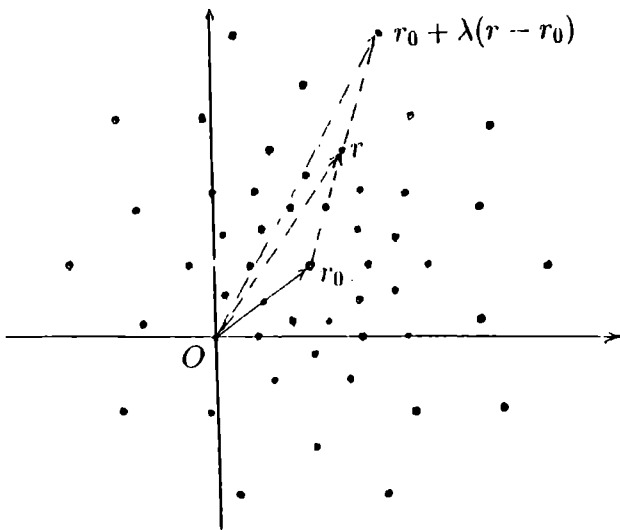


Fig. 4. Transformarea $r \mapsto r_0 + \lambda(r - r_0)$ este o autosimilaritate a mulțimii A dacă $r \in A \Rightarrow r_0 + \lambda(r - r_0) \in A$.

3.2 Autosimilarități ale unei mulțimi model

Fie schema de proiecție netrivială

$$W^{\parallel} \xleftarrow{p^{\parallel}} W^{\parallel} \oplus W^{\perp} \xrightarrow{p^{\perp}} W^{\perp}$$

$$\cup$$

$$\mathcal{D}$$

și fie mulțimea model

$$(3.1) \quad \Lambda(K) = \{p^{\parallel}(x) \mid x \in \mathcal{D}, p^{\perp}(x) \in K\}$$

unde $K \subset W^{\perp}$ este o mulțime compactă

$$K = \overline{\text{int}(K)} \neq \emptyset.$$

Utilizând aplicația

$$(3.2) \quad \mathcal{D}^{\parallel} \longrightarrow W^{\perp} : x \mapsto x^{\circ} = p^{\perp} \left((p^{\parallel}|_{\mathcal{D}})^{-1}(x) \right)$$

unde $\mathcal{D}^{\parallel} = p^{\parallel}(\mathcal{D})$, obținem

$$\mathcal{D} = \{ (x, x^{\circ}) \mid x \in \mathcal{D}^{\parallel} \}$$

$$(3.3) \quad \Lambda(K) = \{ x \in \mathcal{D}^{\parallel} \mid x^{\circ} \in K \}.$$

Vom identifica spațiul W^{\parallel} cu spațiul euclidian \mathbb{E}_n alegând o bază ortonormală $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ în W^{\parallel} și vom privi $\Lambda(K)$ ca pe o submulțime a lui \mathbb{E}_n . O *autosimilaritate* a lui $\Lambda(K)$ este o transformare afină

$$(3.4) \quad A : \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : x \mapsto Ax = \lambda x + v$$

unde $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$, $v \in \mathbb{E}_n$, care satisface relația

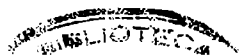
$$(3.5) \quad x \in \Lambda(K) \implies Ax \in \Lambda(K)$$

adică este astfel încât

$$(3.6) \quad \left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{D}^{\parallel} \\ x^{\circ} \in K \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Ax \in \mathcal{D}^{\parallel} \\ (Ax)^{\circ} \in K. \end{array} \right.$$

Fie $\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ o bază a lui W astfel încât

$$\mathcal{D} = \sum_{j=1}^m \mathbb{Z}w_j.$$



Teorema 3.2.1 Dacă $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$, $\lambda' \in [-1, 1]$ și dacă $v \in \mathcal{D}^{\parallel}$ sunt astfel încât elementele matricei aplicației $\lambda p^{\parallel} + \lambda' p^{\perp}$ în baza $\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ să fie întregi și

$$\lambda' K + v^{\circ} \subset K$$

atunci

$$(3.7) \quad A : \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : x \mapsto Ax = \lambda x + v$$

este o autosimilaritate a mulțimii model $\Lambda(K)$.

Demonstrație: Deoarece elementele matricei lui $M = \lambda p^{\parallel} + \lambda' p^{\perp}$ în baza $\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ a lui \mathcal{D} sunt întregi, obținem $M\mathcal{D} \subset \mathcal{D}$, și prin urmare

$$(x, x^{\circ}) \in \mathcal{D} \implies (\lambda x + v, \lambda' x^{\circ} + v^{\circ}) = M(x, x^{\circ}) + (v, v^{\circ}) \in \mathcal{D}.$$

Ținând seama de relația $\lambda' K + v^{\circ} \subset K$ obținem

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{D}^{\parallel} \\ x^{\circ} \in K \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} \lambda x + v \in \mathcal{D}^{\parallel} \\ (\lambda x + v)^{\circ} = \lambda' x^{\circ} + v^{\circ} \in K. \end{array} \right.$$

adică,

$$x \in \Lambda(K) \implies \lambda x + v \in \Lambda(K).$$

□

Spunem că mulțimea K este echilibrată în raport cu y dacă

$$\{y + \alpha(x - y) \mid \alpha \in [-1, 1]\} \subset K$$

oricare ar fi $x \in K$. Fie \mathcal{I} mulțimea tuturor numerelor $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$ pentru care există $\lambda' \in [-1, 1]$ astfel încât elementele matricei lui $\lambda p^{\parallel} + \lambda' p^{\perp}$ în baza $\{w_1, w_2, \dots, w_m\}$ să fie întregi.

Teorema 3.2.2 Dacă $K \subset W^{\perp}$ este o mulțime echilibrată în raport cu $y^{\circ} \in p^{\perp}(\mathcal{D})$ atunci orice element al lui \mathcal{I} este un factor de inflație al mulțimii model $\Lambda(K)$.

Demonstrație: Fie

$$A : W^{\parallel} \longrightarrow W^{\parallel} \quad Ax = y + \lambda(x - y).$$

Deoarece

$$(Ax)^{\circ} = y^{\circ} + \lambda'(x^{\circ} - y^{\circ}) \in K$$

oricare ar fi $x \in \Lambda(K)$, rezultă că $Ax = y + \lambda(x - y) = \lambda x + (1 - \lambda)y$ este o autosimilaritate a mulțimii $\Lambda(K)$. □

Pentru a ilustra noțiunile și rezultatele de mai sus vom prezenta un exemplu. Fie $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$, $\sigma = (1 - \sqrt{5})/2$ și fie schema de proiecție [Bn]

$$\mathbb{R}^2 \xrightarrow{p^{\parallel}} \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \xrightarrow{p^{\perp}} \mathbb{R}^2$$

$$\cup$$

$$\mathcal{D}$$

unde rețeaua

$$\mathcal{D} = \left\{ (\alpha_1 + \alpha_2\tau + (\alpha_3 + \alpha_4\tau)e^{\pi i/5}, \alpha_1 + \alpha_2\sigma + (\alpha_3 + \alpha_4\sigma)e^{3\pi i/5}) \mid \alpha_j \in \mathbb{Z} \right\}$$

este definită utilizând identificarea $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C} : (a, b) \mapsto a + bi$.

În acest caz

$$\mathcal{D}^{\parallel} = \left\{ \alpha_1 + \alpha_2\tau + (\alpha_3 + \alpha_4\tau)e^{\pi i/5} \mid (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) \in \mathbb{Z}^4 \right\}$$

și

$$\left(\alpha_1 + \alpha_2\tau + (\alpha_3 + \alpha_4\tau)e^{\pi i/5} \right)^{\circ} = \alpha_1 + \alpha_2\sigma + (\alpha_3 + \alpha_4\sigma)e^{3\pi i/5}.$$

Fie $r \in (0, \infty)$ și fie

$$(3.8) = \left\{ \alpha_1 + \alpha_2\tau + (\alpha_3 + \alpha_4\tau)e^{\pi i/5} \mid \begin{array}{l} (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) \in \mathbb{Z}^4 \\ |\alpha_1 + \alpha_2\sigma + (\alpha_3 + \alpha_4\sigma)e^{3\pi i/5}| \leq r \end{array} \right\}$$

mulțimea model obținută utilizând fereastra de selecție

$$(3.9) \quad K = \{ y \in \mathbb{R}^2 \mid |y| \leq r \}.$$

Se poate ușor vedea că avem

$$\mathcal{D} = \mathbb{Z}e_1 + \mathbb{Z}e_2 + \mathbb{Z}e_3 + \mathbb{Z}e_4$$

unde

$$e_1 = (1, 0, 1, 0)$$

$$e_2 = (\tau, 0, \sigma, 0)$$

$$e_3 = (\cos(\pi/5), \sin(\pi/5), \cos(3\pi/5), \sin(3\pi/5))$$

$$e_4 = (\tau \cos(\pi/5), \tau \sin(\pi/5), \sigma \cos(3\pi/5), \sigma \sin(3\pi/5))$$

și

$$p^{\parallel} = \mathcal{M} \left(\frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}, \frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}, \frac{1}{\sqrt{5}} \right) \quad p^{\perp} = \mathcal{M} \left(\frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}, \frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}, -\frac{1}{\sqrt{5}} \right)$$

unde

$$\times(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma & 0 & 0 \\ \gamma & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & \gamma \\ 0 & 0 & \gamma & \beta \end{pmatrix}.$$

Matricea

$$M = \lambda p^{\parallel} + \lambda' p^{\perp} = \mathcal{M}(\alpha, \beta, \gamma)$$

are elemente întregi dacă și numai dacă

$$(3.10) \quad \begin{cases} \alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}\lambda + \frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}\lambda' \in \mathbb{Z} \\ \beta = \frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}\lambda + \frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}\lambda' \in \mathbb{Z} \\ \gamma = \frac{1}{\sqrt{5}}\lambda - \frac{1}{\sqrt{5}}\lambda' \in \mathbb{Z}. \end{cases}$$

ceea ce conduce la relațiile

$$(3.11) \quad \begin{cases} \lambda = \frac{\beta+\alpha}{2} + \frac{\beta-\alpha}{2}\sqrt{5} \\ \lambda' = \frac{\beta+\alpha}{2} - \frac{\beta-\alpha}{2}\sqrt{5} \\ \gamma = \beta - \alpha. \end{cases}$$

Conform teoremei 3.2.1, oricare ar fi $\lambda = p + q\sqrt{5} \neq 0$ aparținând mulțimii

$$\left\{ \frac{\beta+\alpha}{2} + \frac{\beta-\alpha}{2}\sqrt{5} \mid \alpha, \beta \in \mathbb{Z}, \left| \frac{\beta+\alpha}{2} - \frac{\beta-\alpha}{2}\sqrt{5} \right| \leq 1 \right\}$$

și oricare ar fi $v \in \mathcal{D}^{\parallel}$ astfel încât $|v^{\circ}| \leq r - |p - q\sqrt{5}|r$, transformarea

$$\mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2 : x \mapsto \lambda x + v$$

este o autosimilaritate a mulțimii model Λ_r . Mai mult, deoarece [Ba]

$$e^{2\pi i/5} = -1 + \tau e^{\pi i/5} \quad \left| (e^{2\pi i/5} x)^{\circ} \right| = |e^{6\pi i/5} x^{\circ}| = |x^{\circ}|$$

oricare ar fi $x \in \mathcal{D}^{\parallel}$, rezultă că Λ_r este invariantă față de transformarea

$$A : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2 : x \mapsto Ax = \lambda \begin{pmatrix} \cos(2\pi/5) & -\sin(2\pi/5) \\ \sin(2\pi/5) & \cos(2\pi/5) \end{pmatrix} x + v.$$

3.3 Autosimilarități ale diagramei de difracție

Fie

$$\mathcal{D}^* = \{ x \in W \mid \langle x, y \rangle \in \mathbb{Z} \text{ oricare ar fi } y \in \mathcal{D} \}$$

rețeaua reciprocă corespunzătoare lui \mathcal{D} , și fie $\mathcal{D}^{\bullet\bullet} = p^{\parallel}(\mathcal{D}^*)$. În acest paragraf vom presupune că schema de proiecție $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D})$ este astfel încât $(W^{\parallel} \oplus W^{\perp}, \mathcal{D}^*)$ să fie de asemenea o schemă de proiecție și vom utiliza aplicația

$$\mathcal{D}^{\bullet\bullet} \longrightarrow W^{\perp} : x \mapsto x^{\circ} = p^{\perp} \left(\left(p^{\parallel}|_{\mathcal{D}^*} \right)^{-1} (x) \right).$$

Dacă mulțimea K este integrabilă Riemann, atunci [Hof1, Hof2] măsura

$$\nu_K = \sum_{x \in \Lambda(K)} \delta_x$$

are o unică autocorelație γ_K , și partea discretă a transformatei Fourier a lui γ_K este

$$(3.12) \quad \hat{\gamma}_K^{discr} = \sum_{\xi \in \mathcal{D}^{\bullet\parallel}} |c_\xi|^2 \delta_\xi$$

unde $c_\xi = \hat{1}_K(-\xi^a)$ și 1_K este funcția caracteristică a mulțimii K . Mai mult, în cazul unei alegeri adecvate a schemei de proiecție, a fereaștrii de selecție și a constantei α , distribuția

$$(3.13) \quad \hat{\gamma}_{K,\alpha}^{discr} = \sum_{\xi \in \mathcal{D}^{\bullet\parallel}, |c_\xi| \geq \alpha} |c_\xi|^2 \delta_\xi$$

oferă [Hof1, Dun1] o bună descriere a spectrului de difracție al anumitor cuasi-cristale dacă termenii sumei sunt interpretați ca reprezentând spoturi de intensitate $|c_\xi|^2$.

Fie $\{w'_1, w'_2, \dots, w'_m\}$ o bază a rețelei \mathcal{D}^* , adică,

$$\mathcal{D}^* = \sum_{j=1}^m \mathbb{Z} w'_j$$

și fie $\alpha \in (0, \infty)$ o constantă astfel încât

$$K_\alpha = \{x \in W^\perp \mid |\hat{1}_K(-x)| \geq \alpha\} \neq \emptyset.$$

Teorema 3.3.1 *Dacă $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$, $\lambda' \in [-1, 1]$, și $v \in \mathcal{D}^{\bullet\parallel}$ sunt astfel încât elementele matricii $\lambda p^\parallel + \lambda' p^\perp$ în baza $\{w'_1, w'_2, \dots, w'_m\}$ să fie întregi și*

$$\lambda' K_\alpha + v^a \subset K_\alpha$$

atunci

$$A : \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : x \mapsto Ax = \lambda x + v$$

este o autosimilaritate a suportului

$$(3.14) \quad \Lambda(K)_\alpha^* = \{\xi \in \mathcal{D}^{\bullet\parallel} \mid |c_\xi| \geq \alpha\}$$

al distribuției $\hat{\gamma}_{K,\alpha}^{discr}$, adică,

$$(3.15) \quad \xi \in \Lambda(K)_\alpha^* \implies A\xi = \lambda\xi + v \in \Lambda(K)_\alpha^*.$$

Demonstrație: Este suficient să observăm că

$$\Lambda(K)_\alpha^* = \{\xi \in \mathcal{D}^{\bullet\parallel} \mid \xi^a \in \Omega - \alpha\}$$

adică, $\Lambda(K)_\alpha^*$ coincide cu mulțimea model definită de schema de proiecție $(W^\parallel \oplus W^\perp, \mathcal{D}^*)$ și fereaștrii de selecție Ω_α . □

Această teoremă ne permite să determinăm unele dintre omotetiile afine care invariază mulțimea $\Lambda(K)_\alpha^*$ a spoturilor diagramei de difracție de intensitate superioară lui α . Factorii de inflație determinați prin această metodă aparțin mulțimii \mathcal{I}^* a tuturor numerelor $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$ pentru care există $\lambda' \in [-1, 1]$ astfel încât elementele matricii aplicației $\lambda p^\parallel + \lambda' p^\perp$ în baza $\{w'_1, w'_2, \dots, w'_m\}$ să fie întregi.

Capitolul 4

G -sisteme de puncte

4.1 Orbitele unei reprezentări. G -sisteme de puncte

Fie $G \subset O(n, \mathbb{R})$ un grup finit de transformări ortogonale

$$(4.1) \quad g : \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n.$$

Mulțimea

$$Gx = \{ gx \mid g \in G \}$$

se numește *orbita* lui G prin x și lungimea ei este dată de formula [Lan, Nai]

$$|Gx| = |G|/|G_x|$$

unde $G_x = \{ g \in G \mid gx = x \}$ este grupul de izotropie al lui x . Orbitele $Gx \neq \{0\}$ vor fi numite *orbite proprii* ale lui G . Deoarece reprezentarea considerată este ortogonală

$$\|gx\| = \|x\| \quad \forall g \in G.$$

Numărul $\|x\|$ este *raza orbitei* Gx .

Definiție: ([Ver2]) Un G -sistem de puncte¹ este o reuniune finită de orbite ale lui G .

Vom nota cu $G\{e_1, e_2, \dots, e_l\}$ G -sistemul de puncte obținut reunind orbitele generate de e_1, e_2, \dots, e_l , adică,

$$G\{e_1, e_2, \dots, e_l\} = \bigcup_{j=1}^l Ge_j.$$

În particular, $G\{e_1\} = Ge_1$ este G -sistemul de puncte format doar din punctele orbitei generate de e_1 . Orbitele având aceeași rază formează un *strat* al G -sistemului

¹ G -cluster în engleză

de puncte considerat. Sistemele de puncte $G_1\{e_1, e_2, \dots, e_l\}$ și $G_2\{e'_1, e'_2, \dots, e'_m\}$, unde G_1, G_2 sunt două grupuri finite, se numesc *egale* dacă are loc egalitatea de mulțimi

$$G_1\{e_1, e_2, \dots, e_l\} = G_2\{e'_1, e'_2, \dots, e'_m\}.$$

În particular, dacă H este un subgrup al lui G și $\{g_1, g_2, \dots, g_j\} \subset G$ este astfel încât $G = \bigcup_{i=1}^j Hg_i$, atunci

$$G\{e_1, \dots, e_l\} = H\{g_1e_1, g_2e_1, \dots, g_je_1, \dots, g_1e_l, g_2e_l, \dots, g_je_l\}.$$

4.2 Reprezentări ale unor grupuri finite și orbitele lor

4.2.1 Grupul ciclic $n \equiv C_n$

Grupul ciclic C_n definit abstract prin relația

$$n \equiv C_n = \langle a \mid a^n = \epsilon \rangle$$

este frecvent identificat cu grupul de rotații ale planului generat de rotația

$$a : \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_2 \quad a(x, y) = \left(x \cos \frac{2\pi}{n} - y \sin \frac{2\pi}{n}, x \sin \frac{2\pi}{n} + y \cos \frac{2\pi}{n} \right)$$

adică este definit prin intermediul uneia dintre reprezentările sale \mathbb{R} -ireductibile. Toate orbitele proprii $C_n(x, y)$ ale lui C_n sunt de lungime n .

4.2.2 Grupul diedral D_n

Grupul diedral

$$D_n = \langle a, b \mid a^n = b^2 = (ab)^2 = \epsilon \rangle$$

este în general identificat cu o reprezentare \mathbb{R} -ireductibilă a sa și anume cu grupul transformărilor ortogonale ale planului care lasă invariant un poligon regulat cu n laturi având centrul în origine. În particular, punctele

$$\left(\cos \frac{2\pi j}{n}, \sin \frac{2\pi j}{n} \right) \quad j \in \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$$

sunt vârfurile unui astfel de poligon și grupul D_n poate fi identificat cu grupul generat de rotația

$$a : \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_2 \quad a(x, y) = \left(x \cos \frac{2\pi}{n} - y \sin \frac{2\pi}{n}, x \sin \frac{2\pi}{n} + y \cos \frac{2\pi}{n} \right)$$

și de simetria

$$b : \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_2, \quad b(x, y) = (x, -y).$$

Dacă n este impar, grupul D_n notat uneori cu $n2$, admite orbitele de lungime

$$D_n(\zeta, 0),$$

unde $\zeta \in (0, \infty)$. Toate celelalte orbite sunt de lungime $2n$.

În cazul în care n este par, grupul D_n , notat uneori cu $n22$, admite orbitele de lungime n

$$D_n(\zeta, 0) \quad D_n \left(\zeta \cos \frac{\pi}{n}, \zeta \sin \frac{\pi}{n} \right)$$

unde $\zeta \in (0, \infty)$. Toate celelalte orbite proprii sunt de lungime $2n$.

4.2.3 Grupul complet al tetraedrului $T_d = \bar{4}3m$

Grupul complet al tetraedrului definit abstract prin

$$T_d = \bar{4}3m = \langle a, b \mid a^4 = b^2 = (ab)^3 = \epsilon \rangle$$

este frecvent identificat cu grupul transformărilor ortogonale care lasă invariant un tetraedru regulat având ca centru originea spațiului \mathbb{E}_3 . În particular, punctele $(-1, -1, -1)$, $(-1, 1, 1)$, $(1, -1, 1)$, $(1, 1, -1)$ sunt vârfurile unui astfel de tetraedru și grupul T_d poate fi definit [Vai] ca fiind grupul generat de transformările

$$a : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad a(x, y, z) = (-y, x, -z)$$

$$b : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad b(x, y, z) = (x, -z, -y).$$

În această definiție T_d este identificat cu una dintre reprezentările sale \mathbb{R} -ireductibile. Orbitele

$$T_d(\zeta, \zeta, \zeta) \quad \text{unde } \zeta \in \mathbb{R} - \{0\}$$

sunt de lungime 4, orbitele

$$T_d(\zeta, 0, 0) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 6, orbitele de lungime 12

$$T_d(\zeta, \xi, \xi) \quad \text{unde } \zeta, \xi \in \mathbb{R}, \quad \xi \neq 0, \quad |\zeta| \neq |\xi|$$

sunt de lungime 12 și toate celelalte orbite proprii sunt de lungime 24.

4.2.4 Grupul tetraedrului $T = 23$

Grupul tetraedrului

$$T = 23 = \langle a, b \mid a^2 = b^3 = (ab)^3 = \epsilon \rangle$$

este subgrupul lui T_d format din rotațiile proprii. În acest caz orbitele

$$T(\zeta, \zeta, \zeta) \quad \text{unde } \zeta \in \mathbb{R} - \{0\}$$

sunt de lungime 4, orbitele

$$T(\zeta, 0, 0) \quad \text{unde } \zeta \in \mathbb{R} - \{0\}$$

sunt de lungime 6 și toate celelalte orbite proprii sunt de lungime 12.

4.2.5 Grupul complet al octaedrului $O_h = m\bar{3}m$

Grupul complet al octaedrului

$$O_h = m\bar{3}m = \langle a, b \mid a^4 = b^6 = (ab)^2 = \epsilon \rangle$$

este frecvent identificat cu una dintre reprezentările lui și anume cu grupul tuturor transformărilor ortogonale care lasă invariant un cub având ca centru originea spațiului \mathbb{E}_3 . Punctele

$$\begin{array}{cccc} (-1, -1, 1) & (-1, 1, 1) & (1, -1, 1) & (1, 1, 1) \\ (-1, -1, -1) & (-1, 1, -1) & (1, -1, -1) & (1, 1, -1) \end{array}$$

sunt vârfurile unui astfel de cub și grupul O_h poate fi identificat [Vai] cu grupul generat de transformările

$$a : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad a(x, y, z) = (y, -x, z)$$

$$b : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad b(x, y, z) = (-y, -z, -x).$$

În această reprezentare orbitele

$$O_h(\zeta, 0, 0) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 6, orbitele

$$O_h(\zeta, \zeta, \zeta) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 8, orbitele

$$O_h(\zeta, \zeta, 0) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 12, orbitele

$$O_h(\zeta, \xi, 0) \quad O_h(\zeta, \zeta, \xi) \quad \text{unde } \zeta, \xi \in (0, \infty), \zeta \neq \xi$$

sunt de lungime 24 și toate celelalte orbite proprii sunt de lungime 48.

4.2.6 Grupul icosaedrului $Y = 235$

Grupul icosaedrului

$$Y = \langle a, b \mid a^5 = b^3 = (ab)^2 = \epsilon \rangle$$

este frecvent identificat cu reprezentarea lui ca grup al tuturor rotațiilor spațiului \mathbb{E}_3 care lasă invariant un icosaedru regulat având ca centru originea. Punctele

$$\begin{array}{cccccc} (1, 0, \tau) & (\tau, -1, 0) & (\tau, 1, 0) & (0, \tau, 1) & (-1, 0, \tau) & (0, -\tau, 1) \\ (-1, 0, -\tau) & (-\tau, 1, 0) & (-\tau, -1, 0) & (0, -\tau, -1) & (1, 0, -\tau) & (0, \tau, -1) \end{array}$$

unde $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$, sunt vârfurile unui astfel de icosaedru și grupul Y poate fi definit ca fiind grupul generat de rotațiile

$$a : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3$$

$$a(x, y, z) = \frac{1}{2} \left(x - \tau y + (\tau - 1)z, \tau x + (\tau - 1)y - z, (\tau - 1)x + y + \tau z \right)$$

$$b: \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad b(x, y, z) = (y, z, x).$$

În această reprezentare, orbitele

$$Y(\zeta, 0, \zeta\tau) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 12 (vârfurile unor icosaedre regulate), orbitele

$$Y(\zeta, \zeta, \zeta) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 20 (vârfurile unor dodecaedre regulate), orbitele

$$Y(\zeta, 0, 0) \quad \text{unde } \zeta \in (0, \infty)$$

sunt de lungime 30 (vârfurile unor icosidodecaedre) și toate celelalte orbite proprii sunt de lungime 60.

4.3 Exemple de G -sisteme de puncte

Secțiunea precedentă conține mai multe exemple de G -sisteme de puncte formate din câte o singură orbită. Vom da în continuare câteva exemple de G -sisteme de puncte obținute reunind două sau trei orbite.

Fie $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$, $0 < \alpha < \beta < \gamma$. Reunind orbitele lui D_4

$$D_4(\alpha, 0) = \{(\alpha, 0), (0, \alpha), (-\alpha, 0), (0, -\alpha)\}$$

$$D_4\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \frac{\beta}{\sqrt{2}}\right) = \left\{ \left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \frac{\beta}{\sqrt{2}}\right), \left(-\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \frac{\beta}{\sqrt{2}}\right), \left(-\frac{\beta}{\sqrt{2}}, -\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right), \left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}, -\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right) \right\}$$

$$D_4\left(\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, \frac{\gamma}{2}\right) = \left\{ \left(\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, \frac{\gamma}{2}\right), \left(\frac{\gamma}{2}, \frac{\gamma\sqrt{3}}{2}\right), \left(-\frac{\gamma}{2}, \frac{\gamma\sqrt{3}}{2}\right), \left(-\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, \frac{\gamma}{2}\right), \right. \\ \left. \left(-\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, -\frac{\gamma}{2}\right), \left(-\frac{\gamma}{2}, -\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}\right), \left(\frac{\gamma}{2}, -\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}\right), \left(\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, -\frac{\gamma}{2}\right) \right\}$$

obținem D_4 -sistemul de puncte cu trei straturi

$$D_4 \left\{ (\alpha, 0), \left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}, \frac{\beta}{\sqrt{2}}\right), \left(\frac{\gamma\sqrt{3}}{2}, \frac{\gamma}{2}\right) \right\}.$$

D_4 -sistemul de puncte cu două straturi

$$D_4\{(1, 0), (\sqrt{2}, 1)\}$$

este reprezentat în Fig. 5. Y -sistemul de puncte

$$Y \left\{ \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\tau+2}}, 0, \frac{\alpha\tau}{\sqrt{\tau+2}}\right), \left(\frac{\beta}{\sqrt{3}}, \frac{\beta}{\sqrt{3}}, \frac{\beta}{\sqrt{3}}\right), (\gamma, 0, 0) \right\}$$

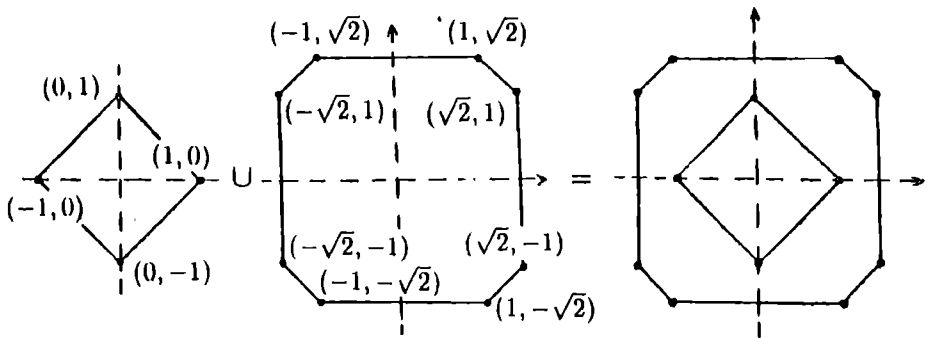


Fig. 5. Reuniind orbitele $D_3(1,0)$ și $D_4(\sqrt{2},1)$ obținem D_4 -sistemul de puncte $D_4\{(1,0),(\sqrt{2},1)\}$.

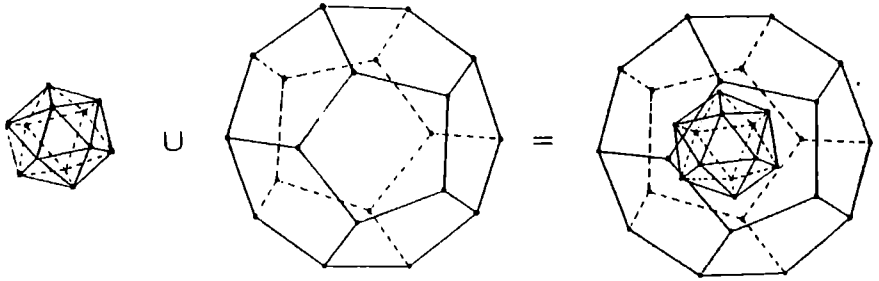


Fig. 6. Reuniind orbitele $Y(1,0,\tau)$ și $Y(1+\tau,1+\tau,1+\tau)$ obținem Y -sistemul de puncte $Y\{(1,0,\tau),(1+\tau,1+\tau,1+\tau)\}$.

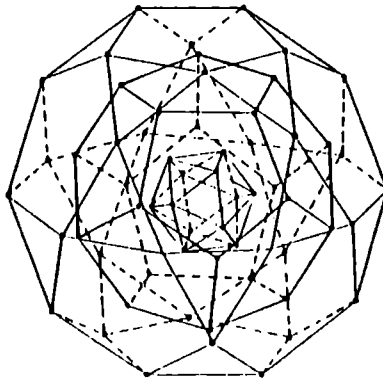


Fig. 7. Y -sistemul de puncte cu trei straturi $Y\{(1,0,\tau),(2,2,2),(4,0,0)\}$.

este format din trei pătri reprezentând vârfurile unui icosaedru regulat, ale unui dodecaedru regulat și respectiv vârfurile unui icosidodecaedru [Tam2]. În Fig. 6 este reprezentat Y -sistemul de puncte cu două straturi

$$Y\{(1, 0, \tau), (1 + \tau, 1 + \tau, 1 + \tau)\}$$

iar în Fig. 7 este prezentat un Y -sistem de puncte cu trei straturi.

4.4 Șiruri convergente de G -sisteme de puncte

Definiție: Un șir de G -sisteme de puncte $(G\{e_{1j}, e_{2j}, \dots, e_{lj}\})_{j=1}^{\infty}$ astfel încât șirul $(e_{ij})_{j=1}^{\infty}$ este convergent oricare ar fi $i \in \{1, 2, \dots, l\}$ se numește *șir convergent de G -sisteme de puncte*, iar G -sistemul de puncte

$$\lim_{j \rightarrow \infty} G\{e_{1j}, e_{2j}, \dots, e_{lj}\} = G\left\{\lim_{j \rightarrow \infty} e_{1j}, \lim_{j \rightarrow \infty} e_{2j}, \dots, \lim_{j \rightarrow \infty} e_{lj}\right\}.$$

este *limita sa*.

Definiție: Spunem că $(G\{e_1(t), e_2(t), \dots, e_l(t)\})_{t \in \mathbb{R}}$ este o *familie continuă de G -sisteme de puncte* dacă funcția

$$\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{E}_n : t \mapsto e_j(t)$$

este o funcție continuă, oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, l\}$.

Dacă $(G\{e_1(t), e_2(t), \dots, e_l(t)\})_{t \in \mathbb{R}}$ este o familie continuă, atunci definim

$$(4.2) \quad \lim_{t \rightarrow t_0} G\{e_1(t), e_2(t), \dots, e_l(t)\} = G\left\{\lim_{t \rightarrow t_0} e_1(t), \lim_{t \rightarrow t_0} e_2(t), \dots, \lim_{t \rightarrow t_0} e_l(t)\right\}.$$

Fie $(f_j)_{j=1}^{\infty}$ șirul lui Fibonacci

$$f_0 = f_1 = 1 \quad f_{j+1} = f_{j-1} + f_j$$

și fie $\theta_j = f_{j+1}/f_j$ oricare ar fi $j \geq 1$. Prin calcul direct se obține că

$$\lim_{t \rightarrow \pi/5} C_5\{(1, 0), (\cos t, \sin t)\} = C_{10}(1, 0)$$

$$\lim_{t \rightarrow 1} D_4\left\{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right), (t, 0)\right\} = D_8(1, 0)$$

$$\lim_{t \rightarrow 1/\sqrt{2}} D_4\{(t, t), (1, 0)\} = D_8(1, 0)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} D_4\left\{\left(1, \frac{1}{j}\right), \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right\} = D_8\{(1, 0)\} \quad (\text{Fig.8})$$

$$\lim_{t \rightarrow 1/2} D_4\{(1, 0), (t\sqrt{3}, t)\} = D_{12}(1, 0)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} T(1, 0, \theta_j) = Y(1, 0, \tau) \quad (\text{Fig.9})$$

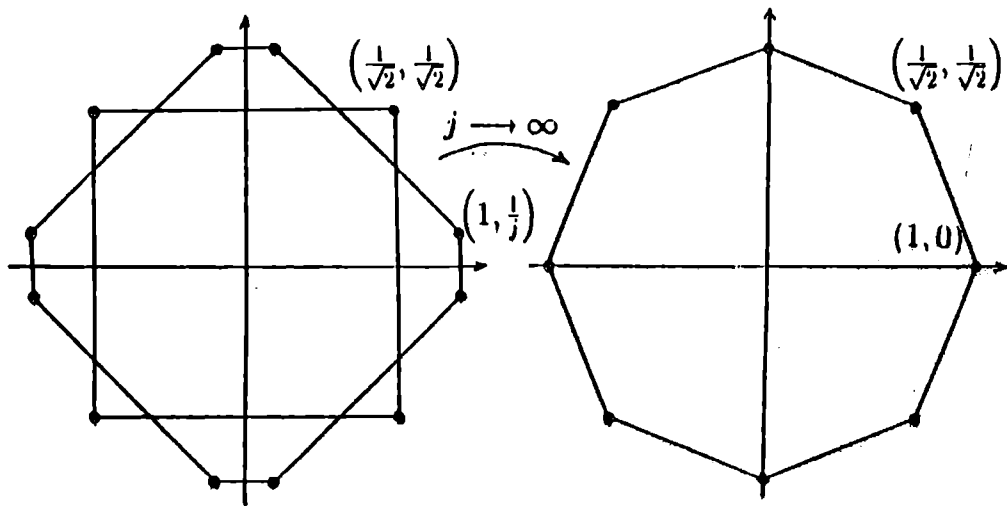


Fig. 8. $\lim_{j \rightarrow \infty} D_4 \left\{ \left(1, \frac{1}{j} \right), \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right\} = D_6(1, 0)$.

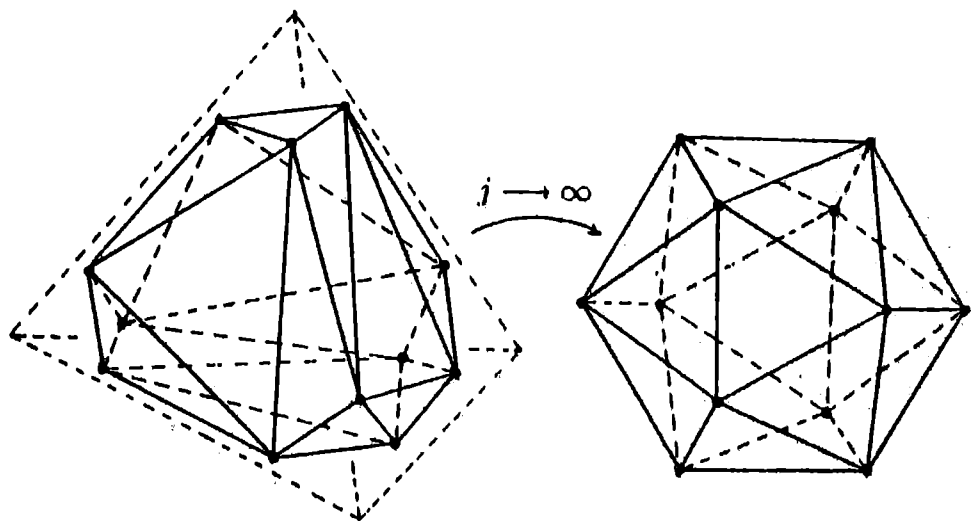


Fig. 9. $\lim_{j \rightarrow \infty} T(1, 0, \theta_j) = Y(1, 0, \tau)$.

$$\lim_{j \rightarrow \infty} T\{(2\theta_j, 0, 0), (1, \theta_j, 1 + \theta_j), (-1, \theta_j, 1 + \theta_j)\} = Y(2\tau, 0, 0)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} T\{(1 + \theta_j, 1 + \theta_j, 1 + \theta_j), (-1 - \theta_j, 1 + \theta_j, 1 + \theta_j), (0, \theta_j, 1 + 2\theta_j)\} = \dot{Y}(1 + \tau, 1 + \tau, 1 + \tau).$$

Familia continuă de D_4 -sisteme de puncte

$$D_4 \left\{ (1, 0), \left((1-t) \frac{1}{\sqrt{2}} + t \frac{\sqrt{3}}{2}, (1-t) \frac{1}{\sqrt{2}} + t \frac{1}{2} \right) \right\}$$

depinzând de parametrul $t \in [0, 1]$, este o *deformare continuă* a lui $D_8(1, 0)$ în $D_{12}(1, 0)$.

4.5 \mathbb{Z} -modulul generat de un G -sistem de puncte

Fie

$$C = G\{e_1, e_2, \dots, e_l\} = \bigcup_{j=1}^l Ge_j = \{e_1, e_2, \dots, e_k\}$$

un G -sistem de puncte, și fie

$$\Sigma_k = \left\{ \sigma : \{1, 2, \dots, k\} \longrightarrow \{1, 2, \dots, k\} \mid \sigma \text{ este bijectivă} \right\}.$$

Pentru fiecare $g \in G$, există o permutare $\sigma_g \in \Sigma_k$ astfel încât

$$ge_j = e_{\sigma_g(j)} \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, k\}.$$

\mathbb{Z} -modulul generat de G -sistemul de puncte considerat

$$\mathcal{L} = \bigoplus_{j=1}^k \mathbb{Z}e_j$$

este o mulțime G -invariantă al lui \mathbb{E}_n . Vom obține o descompunere a acestui \mathbb{Z} -modul utilizând următorul rezultat general.

Teorema 4.5.1 ([Des]) *Orice \mathbb{Z} -modul $\mathcal{G} \subset \mathbb{R}^k$ este suma directă dintre o rețea de rang d și un \mathbb{Z} -module dens într-un subspațiu vectorial al lui \mathbb{R}^k de dimensiune s , unde $d + s$ este dimensiunea subspațiului generat de \mathcal{G} în \mathbb{R}^k .*

Există un subspațiu bine-determinat $V_s \subset \mathbb{E}_n$ astfel încât \mathbb{Z} -modulul $\mathcal{L}_s = \mathcal{L} \cap V_s$ să fie dens în V_s și \mathcal{L} să fie suma directă dintre \mathcal{L}_s și un \mathbb{Z} -modul $\mathcal{L}_d \subset \mathcal{L}$ discret

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_s \oplus \mathcal{L}_d.$$

Teorema 4.5.2 a) *Subspațiul vectorial $V_s \subset \mathbb{E}_n$ este G -invariant.*

b) *\mathbb{Z} -modulul $\mathcal{L}_s \subset \mathbb{E}_n$ este G -invariant.*

c) *Dacă reprezentarea (4.1) a lui G în \mathbb{E}_n este \mathbb{R} -irreductibilă, atunci $V_s = \{0\}$ sau $V_s = \mathbb{E}_n$.*

Demonstrație: Presupunem prin absurd că $\{0\} \neq V_s \neq \mathbb{E}_n$. Pentru fiecare $g \in G$, spațiul $g(V_s)$ este un subspațiu al lui \mathbb{E}_n și

$$\dim g(V_s) = \dim V_s.$$

Fiecare element al lui V_s este limita unui șir de elemente aparținând lui \mathcal{L} , și deoarece $g \in G$ este o izometrie, fiecare element al lui $g(V_s)$ are aceeași proprietate.

Dar

$$\mathcal{L} \subset \bigcup_{h \in \mathcal{L}_s} (h + V_s)$$

și această relație este posibilă numai dacă $g(V_s) = V_s$. Deoarece $\mathcal{L}_s = \mathcal{L} \cap V_s$ obținem că \mathcal{L}_s este G -invariant. \square

De exemplu,

$$\begin{aligned} V_s &= \mathbb{E}_3 & \text{in cazul } C &= Y(1, 0, 0) \\ V_s &= \{0\} & \text{in cazul } C &= T_d(1, 1, 1). \end{aligned}$$

Capitolul 5

Reprezentări definite de G -sisteme de puncte

5.1 Reprezentarea definită de un G -sistem de puncte

Fie $\{g : \mathbb{E}_n \rightarrow \mathbb{E}_n \mid g \in G\}$ o reprezentare ortogonală exactă \mathbb{R} -ireductibilă a unui grup finit G , și fie

$$\mathcal{C} = \bigcup_{r \in S} Gr \cup \bigcup_{r \in S} G(-r) = \{e_1, e_2, \dots, e_k, -e_1, -e_2, \dots, -e_k\}$$

G -sistemul de puncte simetric față de origine generat de o mulțime finită nevidă $S \subset \mathbb{E}_n$ care nu conține vectorul nul. Mulțimea Υ a bijecțiilor $\sigma : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C} : r \mapsto \sigma r$ care satisfac relația

$$\sigma(-r) = -\sigma r \quad \text{oricare ar fi } r \in \mathcal{C}$$

este un subgrup al grupului permutărilor lui \mathcal{C} . Oricare ar fi $\sigma \in \Upsilon$, există numerele $s_1^\sigma, s_2^\sigma, \dots, s_k^\sigma \in \{-1, 1\}$ și o permutare a elementelor mulțimii $\{1, 2, \dots, k\}$ notată deasemenea cu σ astfel încât

$$\sigma e_j = s_{\sigma(j)}^\sigma e_{\sigma(j)}$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, k\}$.

Teorema 5.1.1 Grupul G poate fi identificat cu subgrupul

$$\left\{ \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C} : r \mapsto gr \mid g \in G \right\}$$

al lui Υ , și formula

$$(5.1) \quad g(x_1, \dots, x_k) = (s_1^g x_{g^{-1}(1)}, \dots, s_k^g x_{g^{-1}(k)})$$

definește o reprezentare ortogonală a lui G în \mathbb{E}_k .

Demonstrație: Deoarece subspațiul lui \mathbb{E}_n generat de \mathcal{C} este G -invariant, el trebuie să coincidă cu \mathbb{E}_n . Utilizând relația

$$s_{(hg)(i)}^{hg} e_{(hg)(i)} = (hg)e_i = h(s_{g(i)}^g e_{g(i)}) = s_{g(i)}^g h e_{g(i)} = s_{g(i)}^g s_{(hg)(i)}^h e_{(hg)(i)}$$

obținem $s_{(hg)(i)}^{hg} = s_{g(i)}^g s_{(hg)(i)}^h$, adică, $s_j^{hg} = s_{h^{-1}(j)}^g s_j^h$, ceea ce conduce la

$$\begin{aligned} h(g(x_1, \dots, x_k)) &= h(s_1^g x_{g^{-1}(1)}, \dots, s_k^g x_{g^{-1}(k)}) \\ &= (s_1^h s_{h^{-1}(1)}^g x_{g^{-1}(h^{-1}(1))}, \dots, s_k^h s_{h^{-1}(k)}^g x_{g^{-1}(h^{-1}(k))}) \\ &= (s_1^{hg} x_{(hg)^{-1}(1)}, \dots, s_k^{hg} x_{(hg)^{-1}(k)}) = (hg)(x_1, \dots, x_k). \end{aligned}$$

În plus,

$$\langle gx, gy \rangle = \sum_{i=1}^k (s_i^g)^2 x_{g^{-1}(i)} y_{g^{-1}(i)} = \sum_{j=1}^k x_j y_j = \langle x, y \rangle.$$

□

5.2 G -rețele

Fie reprezentarea

$$(5.2) \quad g(x_1, \dots, x_k) = (s_1^g x_{g^{-1}(1)}, \dots, s_k^g x_{g^{-1}(k)})$$

a lui G în \mathbb{E}_k definită în secțiunea anterioară plecând de la un G -sistem de puncte \mathcal{C} .

Definiție: O rețea G -invariantă $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_k$ se numește G -rețea [Mrt].

Teorema 5.2.1 *Oricare ar fi G -sistemul de puncte \mathcal{C} , rețelele*

$$\mathcal{L}_{SC} = \mathbb{Z}^k = \{(x_1, x_2, \dots, x_k) \mid x_1, x_2, \dots, x_k \in \mathbb{Z}\}$$

$$\mathcal{L}_{FCC} = \{(x_1, x_2, \dots, x_k) \in \mathbb{Z}^k \mid x_1 + x_2 + \dots + x_k \in 2\mathbb{Z}\}$$

$$\mathcal{L}_{BCC} = \{(x_1, x_2, \dots, x_k) \in \mathbb{Z}^k \mid x_i - x_j \in 2\mathbb{Z} \text{ oricare ar fi } i, j\}$$

sunt G -rețele.

Demonstrație: Deoarece pentru $(x_1, x_2, \dots, x_k) \in \mathbb{Z}^k$ și $g \in G$ obținem

$$g(x_1, \dots, x_k) = (s_1^g x_{g^{-1}(1)}, \dots, s_k^g x_{g^{-1}(k)}) \in \mathbb{Z}^k$$

rezultă că

$$g(\mathcal{L}_{SC}) \subset \mathcal{L}_{SC}$$

oricare ar fi $g \in G$. Având în vedere că $s_j^g - 1 \in \{0, -2\}$ și

$$\sum_{j=1}^k s_j^g x_{g^{-1}(j)} = \sum_{j=1}^k x_j + \sum_{j=1}^k (s_j^g - 1)x_{g^{-1}(j)}$$

$$s_i^g x_{g^{-1}(i)} - s_j^g x_{g^{-1}(j)} = (x_{g^{-1}(i)} - x_{g^{-1}(j)}) + (s_i^g - 1)x_{g^{-1}(i)} - (s_j^g - 1)x_{g^{-1}(j)}$$

obținem

$$g(\mathcal{L}_{FCC}) \subset \mathcal{L}_{FCC} \quad g(\mathcal{L}_{BCC}) \subset \mathcal{L}_{BCC}$$

oricare ar fi $g \in G$. □

Rețeaua \mathcal{L}_{SC} , se numește *rețea cubică simplă*, \mathcal{L}_{FCC} se numește *rețea cubică cu fețe centrate*, iar \mathcal{L}_{BCC} se numește *rețea cubică cu volum centrat*.

Definiție: Două *G*-rețele \mathcal{L} și \mathcal{L}' se numesc *echivalente* dacă există o transformare liniară $A : \mathbb{E}_k \rightarrow \mathbb{E}_k$ astfel încât $A\mathcal{L} = \mathcal{L}'$ și $gA = Ag$, oricare ar fi $g \in G$.

Relația astfel definită este o relație de echivalență pe mulțimea *G*-rețelelor din \mathbb{E}_k . Clasele de echivalență corespunzătoare se numesc *tipuri* de *G*-rețele. În particular *G*-rețelele \mathbb{Z}^k și $\kappa\mathbb{Z}^k$ sunt echivalente oricare ar fi $\kappa \in (0, \infty)$.

Tipurile posibile de *G*-rețele corespunzătoare reprezentărilor definite de *G*-sisteme de puncte au fost studiate numai în cazuri particulare. Clasificarea *G*-rețelelor în spații *k*-dimensionale se reduce la determinarea claselor de conjugare pentru subgrupurile finite ale grupului $GL(k, \mathbb{Z})$ al matricelor $k \times k$ cu elemente întregi de determinant ± 1 . Numărul acestor clase este finit conform teoremei lui Jordan-Zassenhaus [Crt].

Este bine-cunoscut [Ca, Mar, Lev, Dun3] că în cazul reprezentării grupului icosaedruului definită în \mathbb{E}_3 de *Y*-sistemul de puncte $Y(1, 0, \tau)$ există exact trei tipuri de *Y*-rețele și anume tipurile corespunzătoare rețelelor \mathcal{L}_{SC} , \mathcal{L}_{FCC} și \mathcal{L}_{BCC} .

5.3 O descompunere canonică

Vom obține câteva rezultate referitoare la descompunerea reprezentării definite de un G -sistem de puncte.

Teorema 5.3.1 Subspațiile

$$(5.3) \quad \mathbb{E}_k^{\parallel} = \{ (\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_k \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_n \}$$

$$(5.4) \quad \mathbb{E}_k^{\perp} = \left\{ (x_1, x_2, \dots, x_k) \mid \sum_{j=1}^k x_j e_j = 0 \right\}$$

ale lui \mathbb{E}_k sunt G -invariante, ortogonale și

$$\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}.$$

Demonstrație: Într-adevăr, $\dim \mathbb{E}_k^{\parallel} = \dim \mathbb{E}_k^{\perp} = k - n$, și

$$(5.5) \quad \begin{aligned} g(\langle r, e_1 \rangle, \dots, \langle r, e_k \rangle) &= (s_1^g \langle r, e_{g^{-1}(1)} \rangle, \dots, s_k^g \langle r, e_{g^{-1}(k)} \rangle) \\ &= (\langle r, g^{-1}e_1 \rangle, \dots, \langle r, g^{-1}e_k \rangle) = (\langle gr, e_1 \rangle, \dots, \langle gr, e_k \rangle) \end{aligned}$$

$$\sum_{j=1}^k s_j^g x_{g^{-1}(j)} e_j = \sum_{j=1}^k x_j s_j^g e_{g(j)} = \sum_{j=1}^k x_j g e_j = g \left(\sum_{j=1}^k x_j e_j \right) = 0$$

$$\sum_{j=1}^k \langle r, e_j \rangle x_j = \left\langle r, \sum_{j=1}^k x_j e_j \right\rangle = 0$$

oricare ar fi $g \in G$, $r \in \mathbb{E}_n$ și $(x_1, \dots, x_k) \in \mathbb{E}_k^{\perp}$. □

Fie $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_n . Utilizând coordonatele vectorilor e_j în raport cu această bază

$$e_j = \sum_{i=1}^n e_j^i u_i$$

definim vectorii

$$w_i = (e_1^i, e_2^i, \dots, e_k^i)$$

unde $i \in \{1, 2, \dots, n\}$. Fie

$$g u_j = \sum_{i=1}^n g_{ij} u_i.$$

Teorema 5.3.2 Vectorii w_1, w_2, \dots, w_n formează o bază ortogonală a lui \mathbb{E}_k^{\perp} și

$$\|w_1\| = \|w_2\| = \dots = \|w_n\|.$$

Demonstrație: Fie

$$a_{jm} = \langle w_j, w_m \rangle = \sum_{i=1}^k e_i^j e_i^m.$$

Deoarece

$$\begin{aligned} a_{jm} &= \sum_{i=1}^k \langle e_i, u_j \rangle \langle e_i, u_m \rangle = \sum_{i=1}^k \langle g^{-1} e_i, u_j \rangle \langle g^{-1} e_i, u_m \rangle \\ &= \sum_{i=1}^k \langle e_i, \sum_{l=1}^n g_{lj} u_l \rangle \langle e_i, \sum_{p=1}^n g_{pm} u_p \rangle = \sum_{l=1}^n \sum_{p=1}^n g_{lj} g_{pm} a_{lp} \end{aligned}$$

avem

$$\sum_{j=1}^n g_{ij} a_{jm} = \sum_{l=1}^n \sum_{p=1}^n \left(\sum_{j=1}^n g_{ij} g_{lj} \right) a_{lp} g_{pm} = \sum_{p=1}^n a_{ip} g_{pm}$$

adică,

$$\begin{pmatrix} g_{11} & g_{1n} \\ \dots & \dots \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{1n} \\ \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{1n} \\ \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{1n} \\ \dots & \dots \\ g_{n1} & g_{nn} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

oricare ar fi $g \in G$. Valorile proprii ale unei matrice simetrice cu elemente reale sunt reale. Deoarece reprezentarea lui G în \mathbb{E}_n este \mathbb{R} -ireductibilă și relația (5.6) este verificată oricare ar fi $g \in G$, obținem ca subspațiul propriu corespunzător valorii proprii α a matricei

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{1n} \\ \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

trebuie să coincidă cu \mathbb{E}_n . Acest lucru este posibil numai dacă

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{1n} \\ \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

adică

$$\|w_1\|^2 = \|w_2\|^2 = \dots = \|w_n\|^2 = \alpha$$

și

$$\langle w_j, w_m \rangle = 0$$

pentru $j \neq m$.

□

Deoarece $w_1 \neq 0$, avem $\alpha \in (0, \infty)$. Vectorii

$$v_1 = \rho w_1, v_2 = \rho w_2, \dots, v_n = \rho w_n$$

unde $\rho = 1/\sqrt{\alpha}$, formează o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_k^{\parallel} .

Teorema 5.3.3 *Reprezentarea lui G în \mathbb{E}_k^{\parallel} este echivalentă cu reprezentarea lui G în \mathbb{E}_n . Izometria*

$$\Xi: \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_k^{\parallel} \quad \Xi r = (\rho \langle r, e_1 \rangle, \rho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \rho \langle r, e_k \rangle)$$

cu proprietatea $\Xi u_i = v_i$ ne permite să identificăm cele două spații.

Demonstrație: Conform relației (5.5) avem $g\Xi = \Xi g$, oricare ar fi $g \in G$.

□

Teorema 5.3.4 *Aplucația $\pi^{\parallel}: \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k$*

$$(5.7) \quad \pi^{\parallel}(x_1, \dots, x_k) = \left(\rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_1, e_i \rangle x_i, \dots, \rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_k, e_i \rangle x_i \right)$$

este proiectorul ortogonal corespunzător subspațiului \mathbb{E}_k^{\parallel} .

Demonstrație: Oricare ar fi $x \in \mathbb{E}_k^{\perp}$ avem

$$\begin{aligned} \pi^{\parallel} x &= \left(\rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_1, e_i \rangle x_i, \dots, \rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_k, e_i \rangle x_i \right) \\ &= \left(\rho^2 \left\langle e_1, \sum_{i=1}^k x_i e_i \right\rangle, \dots, \rho^2 \left\langle e_k, \sum_{i=1}^k x_i e_i \right\rangle \right) = 0. \end{aligned}$$

Dacă $x \in \mathbb{E}_k^{\parallel}$ atunci $x = (\langle r, e_1 \rangle, \dots, \langle r, e_k \rangle)$ pentru un anumit $r = \sum_{j=1}^n r^j u_j \in \mathbb{E}_n$. Deoarece

$$\begin{aligned} \rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_j, e_i \rangle \langle r, e_i \rangle &= \rho^2 \sum_{i=1}^k \left\langle e_j, \sum_{p=1}^n e_i^p u_p \right\rangle \left\langle r, \sum_{q=1}^n e_i^q u_q \right\rangle \\ &= \rho^2 \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \left(\sum_{i=1}^k e_i^p e_i^q \right) \langle e_j, u_p \rangle \langle r, u_q \rangle = \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \delta_{pq} e_j^p r^q = \langle r, e_j \rangle \end{aligned}$$

obținem

$$\pi^{\parallel} x = \left(\rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_1, e_i \rangle \langle r, e_i \rangle, \dots, \rho^2 \sum_{i=1}^k \langle e_k, e_i \rangle \langle r, e_i \rangle \right) = x.$$

□

Matricea lui π^{\parallel} în baza canonică $\varepsilon_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$, ..., $\varepsilon_k = (0, \dots, 0, 1)$ a lui \mathbb{E}_k este

$$(5.8) \quad \pi^{\parallel} = \varrho^2 \begin{pmatrix} \langle e_1, e_1 \rangle & \langle e_1, e_2 \rangle & \dots & \langle e_1, e_k \rangle \\ \langle e_2, e_1 \rangle & \langle e_2, e_2 \rangle & \dots & \langle e_2, e_k \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle e_k, e_1 \rangle & \langle e_k, e_2 \rangle & \dots & \langle e_k, e_k \rangle \end{pmatrix}.$$

Fie $\kappa = 1/\varrho$ și fie

$$\mathcal{L} = \kappa \mathbf{Z}^k.$$

Teorema 5.3.5 \mathbf{Z} -modulul $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_k$ este G -invariant și ținând seama de identificarea $\Xi: \mathbb{E}_n \rightarrow \mathbb{E}_k^{\parallel}$ avem

$$(5.9) \quad \pi^{\parallel} \mathcal{L} = \sum_{i=1}^k \mathbf{Z} e_i.$$

Demonstrație: Într-adevăr, \mathcal{L} este generat de mulțimea $\{\kappa \varepsilon_i \mid i \in \{1, 2, \dots, k\}\}$, și

$$\pi^{\parallel}(\kappa \varepsilon_i) = \varrho(\langle e_1, e_i \rangle, \dots, \langle e_k, e_i \rangle) = \Xi e_i.$$

□

Observație: Plecând de la grupul G identificat cu reprezentarea sa ca grup de transformări ortogonale ale spațiului \mathbb{E}_n se poate obține imediat grupul

$$G_i = G \cup iG$$

unde i este simetria față de origine

$$ix = -x.$$

Oricare ar fi mulțimea $S \subset \mathbb{E}_n$, G -sistemul de puncte simetric față de origine generat de S

$$\mathcal{C} = \bigcup_{r \in S} Gr \cup \bigcup_{r \in S} G(-r) = \{e_1, e_2, \dots, e_k, -e_1, -e_2, \dots, -e_k\}$$

coincide cu G_i -sistemul de puncte simetric față de origine generat de S

$$\mathcal{C} = \bigcup_{r \in S} G_i r \cup \bigcup_{r \in S} G_i(-r) = \{e_1, e_2, \dots, e_k, -e_1, -e_2, \dots, -e_k\}$$

Prin urmare, oricare ar fi mulțimea $S \subset \mathbb{E}_n$, descompunerea $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$ obținută pentru G_i coincide cu cea obținută pentru G .

5.4 O clasă de subspații G-invariante

Descompunerea efectivă a reprezentării lui G în \mathbb{E}_k în sumă directă de reprezentări \mathbb{R} -irreductibile revine la determinarea unor subspații G -invariante ale lui \mathbb{E}_k . Anumite subspații G -invariante ale lui \mathbb{E}_k pot fi obținute cu ajutorul unei extensii a metodei utilizate pentru a defini subspațiul \mathbb{E}_k^{\parallel} . Această extensie va fi prezentată în cadrul acestei secțiuni. Fie

$$(5.10) \quad \Upsilon_0 = \left\{ \sigma \in \Upsilon \mid \sigma G \sigma^{-1} = G \right\}.$$

Teorema 5.4.1 Dacă $\sigma \in \Upsilon_0$ atunci

$$(5.11) \quad \mathbb{E}_k^{\sigma} = \left\{ \langle r, \sigma e_1 \rangle, \dots, \langle r, \sigma e_k \rangle \mid r \in \mathbb{E}_n \right\}$$

este un subspațiu G -invariant al lui \mathbb{E}_k , și $\{w_1^{\sigma}, \dots, w_n^{\sigma}\}$ unde

$$(5.12) \quad w_j^{\sigma} = \langle u_j, \sigma e_1 \rangle, \dots, \langle u_j, \sigma e_k \rangle$$

este o bază ortogonală a lui \mathbb{E}_k^{σ} . Mai mult, $\|w_1^{\sigma}\| = \dots = \|w_n^{\sigma}\|$.

Demonstrație: Fie $g \in G$. Punând $h = \sigma g \sigma^{-1}$, obținem

$$(5.13) \quad \begin{aligned} g \langle r, \sigma e_1 \rangle, \dots, \langle r, \sigma e_k \rangle &= (s_1^g \langle r, \sigma e_{g^{-1}(1)} \rangle, \dots, s_k^g \langle r, \sigma e_{g^{-1}(k)} \rangle) \\ &= \langle r, \sigma(g^{-1}e_1) \rangle, \dots, \langle r, \sigma(g^{-1}e_k) \rangle = \langle r, h^{-1}(\sigma e_1) \rangle, \dots, \langle r, h^{-1}(\sigma e_k) \rangle, \\ &= \langle hr, \sigma e_1 \rangle, \dots, \langle hr, \sigma e_k \rangle \in \mathbb{E}_k^{\sigma}. \end{aligned}$$

Deoarece

$$\begin{aligned} \langle w_i^{\sigma}, w_j^{\sigma} \rangle &= \sum_{m=1}^k \langle u_i, \sigma e_m \rangle \langle u_j, \sigma e_m \rangle = \sum_{m=1}^k \langle u_i, \sigma(g^{-1}e_m) \rangle \langle u_j, \sigma(g^{-1}e_m) \rangle \\ &= \sum_{m=1}^k \langle u_i, h^{-1}(\sigma e_m) \rangle \langle u_j, h^{-1}(\sigma e_m) \rangle = \sum_{m=1}^k \langle hu_i, \sigma e_m \rangle \langle hu_j, \sigma e_m \rangle \\ &= \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n h_{pi} h_{qj} \sum_{m=1}^k \langle u_p, \sigma e_m \rangle \langle u_q, \sigma e_m \rangle = \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n h_{pi} \langle w_p^{\sigma}, w_q^{\sigma} \rangle h_{qj}. \end{aligned}$$

avem

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n h_{mi} \langle w_i^{\sigma}, w_j^{\sigma} \rangle &= \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \left(\sum_{i=1}^n h_{mi} h_{pi} \right) \langle w_p^{\sigma}, w_q^{\sigma} \rangle h_{qj} \\ &= \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^n \delta_{mp} \langle w_p^{\sigma}, w_q^{\sigma} \rangle h_{qj} = \sum_{q=1}^n \langle w_m^{\sigma}, w_q^{\sigma} \rangle h_{qj}. \end{aligned}$$

adică,

$$(5.14) \quad \begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ h_{n1} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle w_1^{\sigma}, w_1^{\sigma} \rangle & \dots & \langle w_1^{\sigma}, w_n^{\sigma} \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle w_n^{\sigma}, w_1^{\sigma} \rangle & \dots & \langle w_n^{\sigma}, w_n^{\sigma} \rangle \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \langle w_1^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_1^\sigma, w_n^\sigma \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle w_n^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_n^\sigma, w_n^\sigma \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & \dots & h_{1n} \\ \dots & \dots & \dots \\ h_{n1} & \dots & h_{nn} \end{pmatrix}.$$

Fie α_σ o valoare proprie a matricei reale și simetrice

$$\begin{pmatrix} \langle w_1^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_1^\sigma, w_n^\sigma \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle w_n^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_n^\sigma, w_n^\sigma \rangle \end{pmatrix}.$$

Deoarece reprezentarea lui G în \mathbb{E}_n este \mathbb{R} -ireductibilă și relația (5.14) are loc oricare ar fi $h \in G$, rezultă că spațiul propriu corespunzător valorii proprii α_σ trebuie să coincidă cu \mathbb{E}_n . Aceasta este posibil doar dacă

$$\begin{pmatrix} \langle w_1^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_1^\sigma, w_n^\sigma \rangle \\ \dots & \dots & \dots \\ \langle w_n^\sigma, w_1^\sigma \rangle & \dots & \langle w_n^\sigma, w_n^\sigma \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_\sigma & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_\sigma & & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & & \alpha_\sigma \end{pmatrix}.$$

adică dacă $\{w_1^\sigma, \dots, w_n^\sigma\}$ este o bază ortogonală a lui \mathbb{E}_k^σ , și

$$\alpha_\sigma = \langle w_1^\sigma, w_1^\sigma \rangle = \langle w_2^\sigma, w_2^\sigma \rangle = \dots = \langle w_n^\sigma, w_n^\sigma \rangle.$$

□

Oricare ar fi $\sigma \in \Upsilon_0$, vectorii

$$(5.15) \quad v_1^\sigma = \varrho_\sigma w_1^\sigma, \quad v_2^\sigma = \varrho_\sigma w_2^\sigma, \quad \dots, \quad v_n^\sigma = \varrho_\sigma w_n^\sigma$$

unde $\varrho_\sigma = 1/\sqrt{\alpha_\sigma}$, formează o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_k^σ .

Teorema 5.4.2 Dacă $\sigma \in \Upsilon_0$ atunci

$$(5.16) \quad \mathbb{E}_k^{\sigma \perp} = \left\{ x \in \mathbb{E}_k \mid \sum_{i=1}^k x_i \sigma e_i = 0 \right\}$$

este un subspațiu G -invariant al lui \mathbb{E}_k orthogonal spațiului \mathbb{E}_k^σ și $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^\sigma \oplus \mathbb{E}_k^{\sigma \perp}$.

Demonstrație: Oricare ar fi $r \in \mathbb{E}_n$ și oricare ar fi $x \in \mathbb{E}_k^{\sigma \perp}$ avem

$$\begin{aligned} & \langle (x_1, \dots, x_k), (\langle r, \sigma e_1 \rangle, \dots, \langle r, \sigma e_k \rangle) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^k x_i \langle r, \sigma e_i \rangle = \left\langle r, \sum_{i=1}^k x_i \sigma e_i \right\rangle = 0. \end{aligned}$$

Deoarece $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ este un sistem de generatori pentru \mathbb{E}_n , rezultă că $\dim \mathbb{E}_k^\sigma = n$, $\dim \mathbb{E}_k^{\sigma \perp} = k - n$, și prin urmare $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^\sigma \oplus \mathbb{E}_k^{\sigma \perp}$. □

Capitolul 6

Cristale periodice și cuasicristale definite de G -sisteme de puncte

6.1 Cristale periodice și cuasicristale

Fie $\{g : \mathbb{E}_n \rightarrow \mathbb{E}_n \mid g \in G\}$ o reprezentare ortogonală exactă \mathbb{R} -ireductibilă a unui grup finit G , și fie

$$C = \bigcup_{r \in S} Gr \cup \bigcup_{r \in S} G(-r) = \{e_1, e_2, \dots, e_k, -e_1, -e_2, \dots, -e_k\}$$

G -sistemul de puncte simetric față de origine generat de o mulțime finită nevidă $S \subset \mathbb{E}_n$ care nu conține vectorul nul sau vectori opuși.

Teorema 6.1.1 \mathbb{Z} -modulul $L = \sum_{j=1}^k \mathbb{Z}e_j$ este fie o rețea, fie dens în \mathbb{E}_k .

Demonstrație: Conform teoremei (4.5.1) L este suma directă dintre un \mathbb{Z} -modul discret și un \mathbb{Z} -modul dens într-un subspațiu V_s al lui \mathbb{E}_n . Deoarece subspațiul V_s este G -invariant (4.5.2) și reprezentarea lui G în \mathbb{E}_n este \mathbb{R} -ireductibilă putem avea fie $V_s = \{0\}$ fie $V_s = \mathbb{E}_n$, adică \mathbb{Z} -modulul L este fie discret fie dens în \mathbb{E}_n . Având în vedere că subspațiul generat de $\{e_1, e_2, \dots, e_k\}$ este G -invariant, el trebuie să coincidă cu \mathbb{E}_n . Prin urmare în cazul în care L este discret rangul lui L este maxim, adică este o rețea în \mathbb{E}_n . \square

Utilizând metoda prezentată în capitolele anterioare se obține o reprezentare a lui G în \mathbb{E}_k și apoi o descompunere a lui \mathbb{E}_k în sumă directă de subspații G -invariante ortogonale

$$\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$$

astfel încât:

(i) Dacă $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ este o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_n și $e_j = \sum_{i=1}^n e_j^i u_i$, atunci vectorii

$$\begin{aligned} w_1 &= (e_1^1, e_2^1, \dots, e_k^1) \\ w_2 &= (e_1^2, e_2^2, \dots, e_k^2) \\ &\dots \dots \dots \\ w_n &= (e_1^n, e_2^n, \dots, e_k^n) \end{aligned}$$

formează o bază ortogonală a lui \mathbb{E}_k^{\parallel} .

(ii) $\|w_1\| = \|w_2\| = \dots = \|w_n\|$ și vectorii

$$v_1 = \rho w_1 \quad v_2 = \rho w_2 \quad v_n = \rho w_n$$

unde $\rho = 1/\|w_1\|$, formează o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_k^{\parallel} .

(iii) Izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_k^{\parallel} : r \mapsto (\rho \langle r, e_1 \rangle, \rho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \rho \langle r, e_k \rangle)$$

este un isomorfism de reprezentări ale lui G , adică,

$$\Xi g = g \Xi$$

și

$$\Xi u_j = v_j$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, $g \in G$.

(iv) \mathbb{Z} -modulul

$$\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^k$$

unde $\kappa = 1/\rho$, este G -invariant și utilizând identificarea Ξ avem

$$\pi^{\parallel}(\mathcal{L}) = \sum_{j=1}^k \mathbb{Z} e_j.$$

Descompunerea

$$\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$$

ne permite să utilizăm metoda proiecției benzii (Fig. 10) și să definim pentru fiecare mulțime mărginită de interior nevid $\Omega \subset \mathbb{E}_k^{\perp}$ mulțimea Delaunay

$$(6.1) \quad \text{mod}(\mathcal{L}, \Omega) = \left\{ x^{\parallel} \mid x \in \mathcal{L}, x^{\perp} \in \Omega \right\}.$$

Dacă $x \in \mathcal{L}$ este astfel încât $x^{\parallel} \in \text{mod}(\mathcal{L}, \Omega)$, atunci printre vecinii lui x^{\parallel} în $\text{mod}(\mathcal{L}, \Omega)$, se află anumite puncte aparținând lui $x^{\parallel} + \mathcal{C}$, și anume, punctele mulțimii

$$\left\{ y^{\parallel} \mid y \in \{x + \kappa \varepsilon_1, \dots, x + \kappa \varepsilon_k, x - \kappa \varepsilon_1, \dots, x - \kappa \varepsilon_k\}, y^{\perp} \in \Omega \right\}.$$

Prin urmare, mulțimea $\text{mod}(\mathcal{L}, \Omega)$ poate fi privită ca reuniunea unei familii de translații ale G -sistemului de puncte \mathcal{C} , parțial ocupate, care se interpenetrează. Putem considera că structura locală a mulțimii $\text{mod}(\mathcal{L}, \Omega)$ este descrisă de \mathcal{C} -sistemul de puncte \mathcal{C} .

G -sistemul de puncte \mathcal{C} .

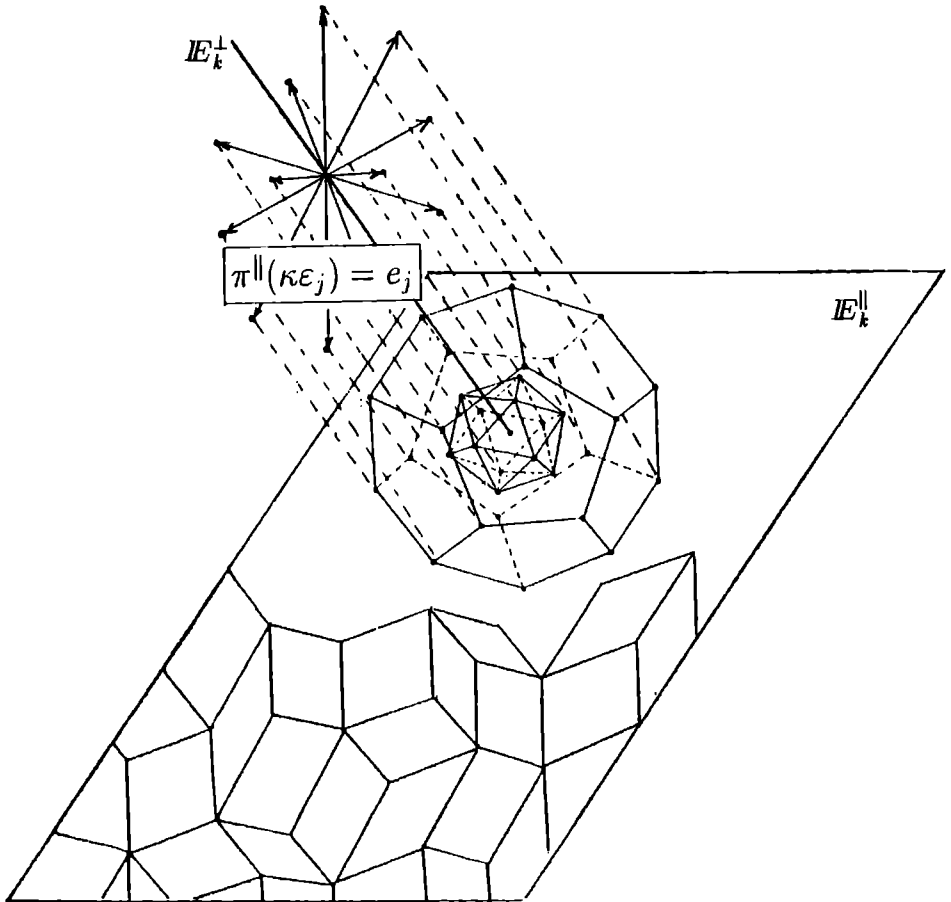
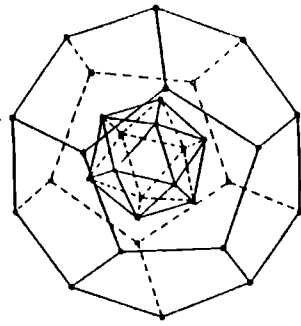


Fig. 10. Plecând de la G -sistemul de puncte $\mathcal{C} \subset \mathbb{E}_n$ se obține o descompunere $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$. Ea permite utilizarea metodei proiecției benzii în vederea definirii unor mulțimi periodice sau cuasiperiodice $Q \subset \mathbb{E}_n$.

Teorema 6.1.2 Fie V un subspațiu vectorial al lui \mathbb{E}_k și fie $\pi : \mathbb{E}_k \rightarrow \mathbb{E}_k$ proiectorul ortogonal corespunzător lui V . Proiecția ortogonală a lui \mathcal{L} pe V este un \mathbb{Z} -modul discret dacă și numai dacă elementele matricei lui π în baza $\{\kappa\varepsilon_1, \kappa\varepsilon_2, \dots, \kappa\varepsilon_k\}$ a lui \mathcal{L} sunt raționale.

Demonstrație: Evident, dacă elementele matricei lui π în baza $\{\kappa\varepsilon_1, \kappa\varepsilon_2, \dots, \kappa\varepsilon_k\}$ sunt raționale atunci proiecția ortogonală a lui \mathcal{L} pe V este un \mathbb{Z} -modul discret. Fie

$$\pi = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & \dots & d_{1k} \\ d_{21} & d_{22} & & d_{2k} \\ \dots & \dots & & \dots \\ d_{k1} & d_{k2} & \dots & d_{kk} \end{pmatrix}$$

matricea lui π în baza $\{\kappa\varepsilon_1, \kappa\varepsilon_2, \dots, \kappa\varepsilon_k\}$, adică, $\pi^d \varepsilon_j = \sum_{i=1}^k d_{ij} \varepsilon_i$. Deoarece

$$d_{ij} = \langle \pi^d \varepsilon_j, \varepsilon_i \rangle = \langle \pi^d \varepsilon_j, \pi^d \varepsilon_i \rangle = \langle \varepsilon_j, \pi^d \varepsilon_i \rangle = d_{ji}$$

matricea π^d este o matrice simetrică. Arătăm că raportul a două elemente matriciale nenule ale lui π situate pe aceeași coloană este un număr rațional. Pentru a simplifica notațiile, vom face demonstrația pentru prima coloană, dar argumente similare sunt valabile pentru oricare dintre coloane. Presupunem că prima coloană conține cel puțin două elemente \mathbb{Q} -liniar independente. Pentru a simplifica notațiile analizăm cazul în care numărul de elemente \mathbb{Q} -liniar independente aflate pe prima coloană este 2, cazul general putând fi tratat similar.

În condițiile prezentate există două numere reale \mathbb{Q} -liniar independente ω, ω' și numerele întregi $\gamma, \alpha_1, \alpha'_1, \dots, \alpha_k, \alpha'_k$ astfel încât

$$d_{j1} = \frac{\alpha_j}{\gamma} \omega + \frac{\alpha'_j}{\gamma} \omega'$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, k\}$. Avem $d_{11} \neq 0$ deoarece din relația $\pi \circ \pi = \pi$ rezultă că

$$d_{11} = (d_{11})^2 + (d_{21})^2 + \dots + (d_{k1})^2.$$

Fără a reduce generalitatea, putem alege $\omega = \gamma d_{11}$, și deci,

$$(6.2) \quad \pi \varepsilon_1 = \frac{\omega}{\gamma} (\varepsilon_1 + \alpha_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha_k \varepsilon_k) + \frac{\omega'}{\gamma} (\alpha'_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k \varepsilon_k).$$

Egalitatea $\pi \circ \pi = \pi$ ne permite să scriem această relație sub forma

$$\pi \varepsilon_1 = \frac{\omega}{\gamma} \pi (\varepsilon_1 + \alpha_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha_k \varepsilon_k) + \frac{\omega'}{\gamma} \pi (\alpha'_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k \varepsilon_k)$$

și apoi sub forma

$$\pi [(\omega - \gamma) \varepsilon_1 + \omega (\alpha_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha_k \varepsilon_k) + \omega' (\alpha'_2 \varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k \varepsilon_k)] = 0.$$

Vom analiza întâi dacă numerele $\omega - \gamma$, ω și ω' pot fi \mathbb{Q} -liniar independente. Conform teoremei lui Kronecker ([Mey1], pag. 286), oricare ar fi $\eta > 0$ există un număr real t și numerele întregi μ_1, μ_2, μ_3 astfel încât

$$|t(\omega - \gamma) - \mu_1| \leq \eta \quad |t\omega - \mu_2| \leq \eta \quad |t\omega' - \mu_3| \leq \eta.$$

Aceasta înseamnă că există un vector

$$y = \kappa[\mu_1\varepsilon_1 + \mu_2(\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha_k\varepsilon_k) + \mu_3(\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k\varepsilon_k)] \in \mathcal{L}$$

astfel încât

$$\|\pi y\| \leq \kappa\eta(\|\pi\varepsilon_1\| + \|\pi(\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha_k\varepsilon_k)\| + \|\pi(\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k\varepsilon_k)\|).$$

Deoarece $\pi(\mathcal{L}) \subset V$ este o mulțime discretă, trebuie să avem $\pi y = 0$ pentru η suficient de mic, ceea ce nu este posibil decât dacă

$$(6.3) \quad \pi\varepsilon_1 = 0$$

$$\pi(\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha_k\varepsilon_k) = 0$$

$$\pi(\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \alpha'_k\varepsilon_k) = 0.$$

Contradicția existentă între relațiile (6.2) și (6.3) arată că $\omega - \gamma$, ω , ω' nu pot fi \mathbb{Q} -liniar independente. Prin urmare există numerele întregi β, β' și γ' astfel încât

$$\omega - \gamma = \frac{\beta}{\gamma'}\omega + \frac{\beta'}{\gamma'}\omega'$$

și deci ,

$$\pi[\omega(\beta\varepsilon_1 + \gamma'\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha_k\varepsilon_k) + \omega'(\beta'\varepsilon_1 + \gamma'\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha'_k\varepsilon_k)] = 0.$$

Conform teoremei lui Kronecker, oricare ar fi $\eta > 0$, există un număr real t și numerele întregi μ'_1, μ'_2 , astfel încât

$$|t\omega - \mu'_1| \leq \eta \quad |t\omega' - \mu'_2| \leq \eta.$$

Aceasta înseamnă că există un vector

$$y' = \kappa[\mu'_1(\beta\varepsilon_1 + \gamma'\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha_k\varepsilon_k) + \mu'_2(\beta'\varepsilon_1 + \gamma'\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha'_k\varepsilon_k)] \in \mathcal{L}$$

astfel încât

$$\|\pi y'\| \leq \kappa\eta(\|\pi(\beta\varepsilon_1 + \gamma'\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha_k\varepsilon_k)\| + \|\pi(\beta'\varepsilon_1 + \gamma'\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha'_k\varepsilon_k)\|).$$

Deoarece $\pi(\mathcal{L}) \subset V$ este o mulțime discretă, trebuie să avem $\pi y' = 0$ pentru orice η destul de mic, ceea ce nu este posibil decât dacă

$$\pi(\beta\varepsilon_1 + \gamma'\alpha_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha_k\varepsilon_k) = 0$$

$$\pi(\beta'\varepsilon_1 + \gamma'\alpha'_2\varepsilon_2 + \dots + \gamma'\alpha'_k\varepsilon_k) = 0.$$

Înmulțind scalar a doua relație cu ε_1 , obținem

$$\beta'\omega + \gamma'\alpha'_2(\omega\alpha_2 + \omega'\alpha'_2) + \dots + \gamma'\alpha'_k(\omega\alpha_k + \omega'\alpha'_k) = 0$$

adică,

$$\omega(\beta' + \gamma'\alpha_2\alpha'_2 + \dots + \gamma'\alpha_k\alpha'_k) + \gamma'\omega'[(\alpha'_2)^2 + \dots + (\alpha'_k)^2] = 0$$

Deoarece ω și ω' sunt \mathbb{Q} -liniar independente, obținem

$$(\alpha'_2)^2 + \dots + (\alpha'_k)^2 = 0$$

adică,

$$\alpha'_2 = \alpha'_3 = \dots = \alpha'_k = 0.$$

Prin urmare avem $d_{j1} = \alpha_j\omega$, oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, k\}$, ceea ce este în contradicție cu presupunerea că prima coloană conține două numere reale \mathbb{Q} -liniar independente. Contradicția obținută arată că raportul a două elemente nenule situate pe aceeași coloană este un număr rațional. Mai mult, din faptul că matricea este simetrică rezultă că raportul oricăror elemente nenule ale ei este un număr rațional. Aceasta este posibil numai dacă π este produsul dintre un număr real ω și o matrice M cu elemente întregi, adică dacă $\pi = \omega M$. Însă din egalitatea $\pi \circ \pi = \pi$ rezultă că există un număr rațional α astfel încât $\omega^2 = \alpha\omega$. ceea ce arată că ω este deasemenea un număr rațional. \square

Conform teoremei (6.1.1) $\pi^{\parallel}(\mathcal{L}) = \sum_{j=1}^k \mathbb{Z}e_j$ este fie o rețea în $\mathbb{E}_k^{\parallel} \equiv \mathbb{E}_n$, fie un \mathbb{Z} -modul dens.

Teorema 6.1.3 *Dacă $\pi^{\parallel}(\mathcal{L})$ este o rețea, atunci $\text{mod}(\mathcal{D}, \Omega)$ este o reuniune finită de translații ale rețelei $L_0 = \mathcal{L} \cap \mathbb{E}_k^{\parallel}$.*

Demonstrație: Conform teoremei anterioare, matricea lui π^{\parallel} în baza $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k\}$ are elemente raționale. Deoarece matricea proiecteurului $\pi^{\perp} = 1 - \pi^{\parallel}$ în baza $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k\}$ are deasemenea elemente raționale, rezultă că $\pi^{\perp}(\mathcal{L})$ este un \mathbb{Z} -modul discret și prin urmare $\Omega \cap \pi^{\perp}(\mathcal{L})$ este o mulțime finită. Pentru a încheia demonstrația este suficient să observăm că dacă $v \in \mathcal{L}$ este astfel încât $\pi^{\perp}v \in \Omega$, atunci

$$\left\{ \pi^{\parallel}x \mid x \in \mathcal{L}, \pi^{\perp}x \in \Omega \right\} = \pi^{\parallel}v + L_0.$$

\square

Vom utiliza pentru $\text{mod}(\mathcal{D}, \Omega)$ termenul de *cristal* în cazul în care $\pi^{\parallel}(\mathcal{L})$ este o rețea în \mathbb{E}_k^{\parallel} și pe cel de *cuasicristal* în cazul în care $\pi^{\parallel}(\mathcal{L})$ este dens în \mathbb{E}_k^{\parallel} .

Mulțimea $\text{mod}(\mathcal{D}, \Omega)$ depinde de

- grupul G ,

- de reprezentarea ortogonală \mathbb{R} -ireductibilă a lui G utilizată,
- de generatorii e_1, e_2, \dots, e_m ai G -sistemului de puncte,
- de fereastra de selecție $\Omega \subset \mathbb{E}_k^\perp$ utilizată,

dar depinde de asemenea de alegerea vectorilor e_1, e_2, \dots, e_k și a ordinii lor în reprezentarea G -sistemului de puncte \mathcal{C} sub forma

$$\mathcal{C} = \{e_1, e_2, \dots, e_k, -e_1, -e_2, \dots, -e_k\}.$$

O alegere "standard" pentru fereastra de selecție Ω este proiecția $\pi^\perp([-\kappa/2, \kappa/2]^k)$ a hipercubului $[-\kappa/2, \kappa/2]^k$ eventual translatată și modificată convenabil pe frontieră. Pentru a indica că mulțimea $\text{mod}(\mathcal{C}, \Omega)$ s-a obținut plecând de la G -sistemul de puncte simetric față de origine generat de mulțimea $S = \{s_1, s_2, \dots, s_m\}$ și de la fereastra de selecție standard vom folosi uneori notația

$$G[s_1, s_2, \dots, s_m]$$

în loc de $\text{mod}(\mathcal{C}, \Omega)$.

6.2 Autosimilarități ale cuasicristalelor

Vom prezenta folosind notațiile din secțiunea anterioară unele detalii privind studiul autosimilarităților cuasicristalelor definite prin metoda proiecției benzii în cazul în care fereastra de selecție este o bilă. Utilizarea proiectoarelor ortogonale corespunzătoare subspațiilor descompunerii reprezentării definite lui G în \mathbb{E}_k în reprezentări \mathbb{R} -ireductibile permite determinarea unora dintre autosimilaritățile cuasicristalului. Fie

$$Q = \left\{ x \mid x \in \mathcal{C}, \|x^\perp\| \leq \vartheta \right\}$$

un cuasicristal definit utilizând drept fereastră de selecție bila închisă de rază ϑ , unde $\vartheta \in (0, \infty)$.

Reprezentarea lui G în \mathbb{E}_k^\parallel este \mathbb{R} -ireductibilă, dar, în general, reprezentarea lui G în \mathbb{E}_k^\perp este o sumă ortogonală de reprezentări \mathbb{R} -ireductibile. Fie

$$\mathbb{E}_k^\perp = \mathbb{E}_{k,1}^\perp \oplus \mathbb{E}_{k,2}^\perp \oplus \dots \oplus \mathbb{E}_{k,m}^\perp$$

descompunerea corespunzătoare a lui \mathbb{E}_k^\perp , și fie

$$\pi^\perp = \pi_1^\perp + \pi_2^\perp + \dots + \pi_m^\perp$$

descompunerea corespunzătoare a proiectoarei π^\perp . Teoria caracterelor oferă informații privind această descompunere.

Teorema 6.2.1 Dacă $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$ și $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m \in [-1, 1]$ sunt constante reale astfel încât elementele matricii

$$M = \lambda \pi^{\parallel} + \lambda_1 \pi_1^{\perp} + \dots + \lambda_m \pi_m^{\perp}$$

să fie întregi, atunci

$$\mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_n : r \mapsto \lambda r.$$

este o autosimilaritate a lui \mathcal{Q} , adică $\lambda \mathcal{Q} \subset \mathcal{Q}$.

Demonstrație: Deoarece $\pi^{\perp}(Mx) = \lambda_1 \pi_1^{\perp} x + \dots + \lambda_m \pi_m^{\perp} x$ și

$$\|\pi^{\perp}(Mx)\|^2 = \lambda_1^2 \|\pi_1^{\perp} x\|^2 + \dots + \lambda_m^2 \|\pi_m^{\perp} x\|^2 \leq \|\pi_1^{\perp} x\|^2 + \dots + \|\pi_m^{\perp} x\|^2 = \|\pi^{\perp} x\|^2$$

obținem

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp} x\| < \vartheta \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Mx \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp}(Mx)\| < \vartheta \end{array} \right.$$

și deci

$$\pi^{\parallel} x \in \mathcal{Q} \implies \pi^{\parallel}(Mx) = \lambda \pi^{\parallel} x \in \mathcal{Q}.$$

□

6.3 Metoda suprafețelor atomice

În modelarea matematică a unui cuasicristal ar fi de dorit să se plece de la datele experimentale cuprinse în mare parte în imaginea obținută prin difracție. Vom analiza pe scurt o astfel de abordare și unele dintre dificultățile existente. Presupunem că există o funcție G -invariantă $\psi : L \rightarrow \mathbb{C}$

$$\psi(gq) = \psi(q)$$

definită pe \mathbf{Z} -modulul

$$L = \varrho^2 \sum_{j=1}^k \mathbf{Z} e_j$$

astfel încât

$$\Psi = \sum_{q \in L} \psi(q) \delta_q$$

să fie transformata Fourier a unui cuasicristal definit de un G -sistem de puncte. Utilizând transformarea Fourier inversă se obține funcția care descrie distribuția de masă în interiorul cuasicristalului

$$\mathcal{F}^{-1}[\Psi](r) = \sum_{q \in L} \psi(q) \exp(2\pi i \langle r, q \rangle) = \sum_{q \in L} \psi(q) \exp\left(2\pi i \varrho^2 \sum_{j=1}^k q_j \langle r, e_j \rangle\right)$$

unde $q = \varrho^2 \sum_{j=1}^k q_j e_j$.

Identificând spațiile \mathbb{E}_n și

$$\mathbb{E}_k^{\parallel} = \{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_k \rangle \mid r \in \mathbb{E}_n \}$$

cu ajutorul izomorfismului

$$\Xi: \mathbb{E}_n \longrightarrow \mathbb{E}_k^{\parallel}: r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_k \rangle)$$

putem privi $\mathcal{F}^{-1}[\Psi]$ ca fiind o funcție definită pe \mathbb{E}_k^{\parallel}

$$\mathcal{F}^{-1}[\Psi](x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{q \in L} \psi(q) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k q_j x_j \right).$$

Se poate vedea că această funcție este restricția la \mathbb{E}_k^{\parallel} a funcției

$$F_{\psi}: \mathbb{E}_m \longrightarrow \mathbb{C} \quad F_{\psi}(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{q \in L} \psi(q) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k q_j x_j \right).$$

Produsul semidirect de grupuri

$$\tilde{G} = \{ g: \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k \mid g \in G \} \times \mathcal{L} \quad (g, x)(h, y) = (gh, gy + x)$$

este un grup cristalografic în \mathbb{E}_k .

Teorema 6.3.1 *Funcția F_{ψ} este \tilde{G} -invariantă, complet determinată de restricția sa la hipercubul*

$$[0, \kappa]^k = [0, \kappa] \times [0, \kappa] \times \dots \times [0, \kappa]$$

unde $\kappa = 1/\varrho$.

Demonstrație: Funcția F_{ψ} este o funcție periodică cu perioadele $\kappa \varepsilon_1, \dots, \kappa \varepsilon_k$

$$F_{\psi}(x_1, \dots, x_{j-1}, x_j + \kappa, x_{j+1}, \dots, x_k) = F_{\psi}(x_1, \dots, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \dots, x_k)$$

G -invariantă

$$\begin{aligned} F_{\psi}(gx) &= F_{\psi}(s_1^g x_{g^{-1}(1)}, \dots, s_k^g x_{g^{-1}(k)}) = \sum_{q \in L} \psi(q) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k q_j s_j^g x_{g(j)} \right) \\ &= \sum_{q \in L} \psi(q) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k q_{g^{-1}(j)} s_{g^{-1}(j)} x_j \right) \\ &= \sum_{gq \in L} \psi(gq) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k (gq)_{g^{-1}(j)} s_{g^{-1}(j)} x_j \right) \\ &= \sum_{q \in L} \psi(q) \exp \left(2\pi i \varrho \sum_{j=1}^k q_j x_j \right) = F_{\psi}(x). \end{aligned}$$

□

Cuasicristalul considerat este complet determinat de funcția \tilde{G} -invariantă F_ψ corespunzătoare. Deoarece doar funcția

$$\mathbb{E}_n \longrightarrow [0, \infty) : q \mapsto |\psi(q)|^2$$

poate fi obținută (cu o anumită precizie) din datele experimentale, în cazul unui cuasicristal concret nu există informațiile necesare pentru a putea determina funcția F_ψ prin calcul. Utilizarea \tilde{G} -invarianței lui F_ψ și alte restricții bazate pe anumite considerații fizice (distanță minimală între atomi, densitate, etc.) permit, în general, pentru un cuasicristal dat să se aleagă funcția F_ψ astfel ca acordul cu datele experimentale să fie acceptabil. Funcția F_ψ numită *suprafață atomică* [Gra, Kat2, Bo] este, în general, aleasă dintre funcțiile caracteristice ale anumitor reuniuni \tilde{G} -invariante de poliedre

$$F : \mathbb{E}_k \longrightarrow \{0, 1\} \quad F(x) = \begin{cases} 1 & \text{daca } x \in \bigcup_{j=1}^m \bigcup_{g \in \tilde{G}} (gt_j + K_j) \\ 0 & \text{in alte cazuri} \end{cases}$$

unde $t_1, t_2, \dots, t_m \in [0, \kappa]^k$, și $K_1, K_2, \dots, K_m \subset \mathbb{E}_k^\perp$ sunt mulțimi G -invariante astfel încât

$$(gt_i + K_i) \cap (ht_j + K_j) = \emptyset$$

oricare ar fi $g, h \in \tilde{G}$, $i, j \in \{1, 2, \dots, m\}$, $i \neq j$.

Deoarece \mathbb{E}_k^\parallel și \mathbb{E}_k^\perp sunt subspații ortogonale G -invariante, subspațiile afine $x + \mathbb{E}_k^\parallel$ și $y + \mathbb{E}_k^\perp$ satisfac relațiile

$$\begin{aligned} g(x + \mathbb{E}_k^\parallel) &= gx + \mathbb{E}_k^\parallel & g(y + \mathbb{E}_k^\perp) &= gy + \mathbb{E}_k^\perp \\ (x + \mathbb{E}_k^\parallel) \cap (y + \mathbb{E}_k^\perp) &= \{x^\perp + y^\parallel\} \end{aligned}$$

oricare ar fi $g \in G$, $x, y \in \mathbb{E}_k$.

Pentru orice $y \in \mathbb{E}_k$, izomorfismul afin

$$\mathbb{E}_n \longrightarrow y + \mathbb{E}_k^\parallel : r \mapsto y + (\varrho < r, e_1 >, \dots, \varrho < r, e_k >)$$

ne permite să identificăm spațiul "fizic" \mathbb{E}_n cu spațiul afin $y + \mathbb{E}_k^\parallel$. Mulțimea

$$(6.4) \quad \{x \in \mathbb{E}_k \mid F(x) = 1\} \cap (y + \mathbb{E}_k^\parallel)$$

este mulțimea pozițiilor atomilor cuasicristalului definit de suprafața atomică F și de vectorul $y \in \mathbb{E}_k$.

În particular, dacă Ω este proiecția pe \mathbb{E}_k^\perp a hipercubului $[-\kappa/2, \kappa/2]^k$, atunci pentru $y = 0$ și

$$F : \mathbb{E}_k \longrightarrow \{0, 1\} \quad F(x) = \begin{cases} 1 & \text{daca } x \in \bigcup_{g \in \tilde{G}} g(\Omega) \\ 0 & \text{in alte cazuri} \end{cases}$$

obținem

$$\{x \in \mathbb{E}_k \mid F(x) = 1\} \cap (y + \mathbb{E}_k^\parallel) = \{x^\parallel \mid x \in \mathcal{L}, x^\perp \in \Omega\}$$

adică, metoda benzii poate fi considerată ca un caz particular al metodei suprafețelor atomice [Gra].

Capitolul 7

Cuasicristale definite de G -sisteme de puncte

7.1 Cuasicristale definite de $D_8(1,0)$

În acest paragraf vom arăta cum se obține utilizând formalismul prezentat mai sus pavajul octogonal, pavaj bine cunoscut specialiștilor în fizica cuasicristalelor, și cum se determină unele dintre autosimilaritățile lui.

Considerăm reprezentarea bidimensională uzuală

$$a(x, y) = (x/\sqrt{2} - y/\sqrt{2}, x/\sqrt{2} + y/\sqrt{2}) \quad b(x, y) = (x, -y)$$

a grupului diedral

$$D_8 = \langle a, b \mid a^8 = b^2 = (ab)^2 = e \rangle$$

și D_8 -sistemul de puncte generat de mulțimea $S = \{(1,0)\}$ (Fig. 11)

$$C = D_8(1,0) = \{e_1, e_2, e_3, e_4, -e_1, -e_2, -e_3, -e_4\}$$

unde $e_1 = (1,0)$, $e_2 = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$, $e_3 = (0,1)$, $e_4 = (-1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$.

Acțiunea generatorilor grupului D_8 pe mulțimea C poate fi descrisă de transformările

$$a = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\ e_2 & e_3 & e_4 & -e_1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\ e_1 & -e_4 & -e_3 & -e_2 \end{pmatrix}.$$

Relațiile corespunzătoare

$$a = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 \\ \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & -\varepsilon_1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 \\ \varepsilon_1 & -\varepsilon_4 & -\varepsilon_3 & -\varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

unde $\varepsilon_1 = (1,0,0,0)$, $\varepsilon_2 = (0,1,0,0)$, $\varepsilon_3 = (0,0,1,0)$, $\varepsilon_4 = (0,0,0,1)$, definesc reprezentarea ortogonală

$$a(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_4, x_1, x_2, x_3) \quad b(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, -x_4, -x_3, -x_2)$$

a lui D_8 în \mathbb{E}_4 .

Alegând $u_1 = (1, 0)$, $u_2 = (0, 1)$, se obține

$$w_1 = (1, 1/\sqrt{2}, 0, -1/\sqrt{2}) \quad w_2 = (0, 1/\sqrt{2}, 1, 1/\sqrt{2})$$

$\rho = 1/\sqrt{2}$, $\kappa = 1/\rho = \sqrt{2}$, și $\mathcal{L} = \sqrt{2}\mathbb{Z}^4$. Vectorii $v_1 = (1/\sqrt{2}, 1/2, 0, -1/2)$ și $v_2 = (0, 1/2, 1/\sqrt{2}, 1/2)$ formează o bază ortonormată a subspațiului D_8 -invariant

$$\mathbb{E}_4^{\parallel} = \{(\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \langle r, e_3 \rangle, \langle r, e_4 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_2\}$$

și izometria

$$\Xi: \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_4^{\parallel}: r \mapsto (\rho \langle r, e_1 \rangle, \rho \langle r, e_2 \rangle, \rho \langle r, e_3 \rangle, \rho \langle r, e_4 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale lui D_8 astfel încât $\Xi(u_1) = v_1$, $\Xi(u_2) = v_2$, ne permite să identificăm cele două spații.

Deoarece transformarea

$$\sigma = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\ e_1 & -e_2 & e_3 & -e_4 \end{pmatrix}$$

satisface relațiile

$$\sigma a \sigma^{-1} = a^5 \quad \sigma b \sigma^{-1} = b$$

obținem $\sigma D_8 \sigma^{-1} = D_8$. Conform teoremei (5.4.1) spațiul

$$\mathbb{E}_4^{\sigma} = \{(\langle r, \sigma e_1 \rangle, \langle r, \sigma e_2 \rangle, \langle r, \sigma e_3 \rangle, \langle r, \sigma e_4 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_2\}$$

este D_8 -invariant și admite baza ortogonală

$$\{(1, -1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2}), (0, -1/\sqrt{2}, 1, -1/\sqrt{2})\}.$$

În plus, spațiul \mathbb{E}_4^{σ} coincide cu ortogonalul \mathbb{E}_4^{\perp} al lui \mathbb{E}_4^{\parallel}

$$\mathbb{E}_4^{\perp} = \mathbb{E}_4^{\sigma}.$$

Proiectorii corespunzători spațiilor \mathbb{E}_4^{\parallel} și \mathbb{E}_4^{\perp} sunt

$$\pi^{\parallel} = \Theta(1/2, 1/(2\sqrt{2})) \quad \pi^{\perp} = \Theta(1/2, -1/(2\sqrt{2}))$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & -\beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ -\beta & 0 & \beta & \beta \end{pmatrix}.$$

Se obține în acest fel schema de proiecție $(\mathbb{E}_4^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_4^{\perp}, \mathcal{L})$.

Fig. 11. D_8 -sistemul de puncte $D_8(1,0)$.

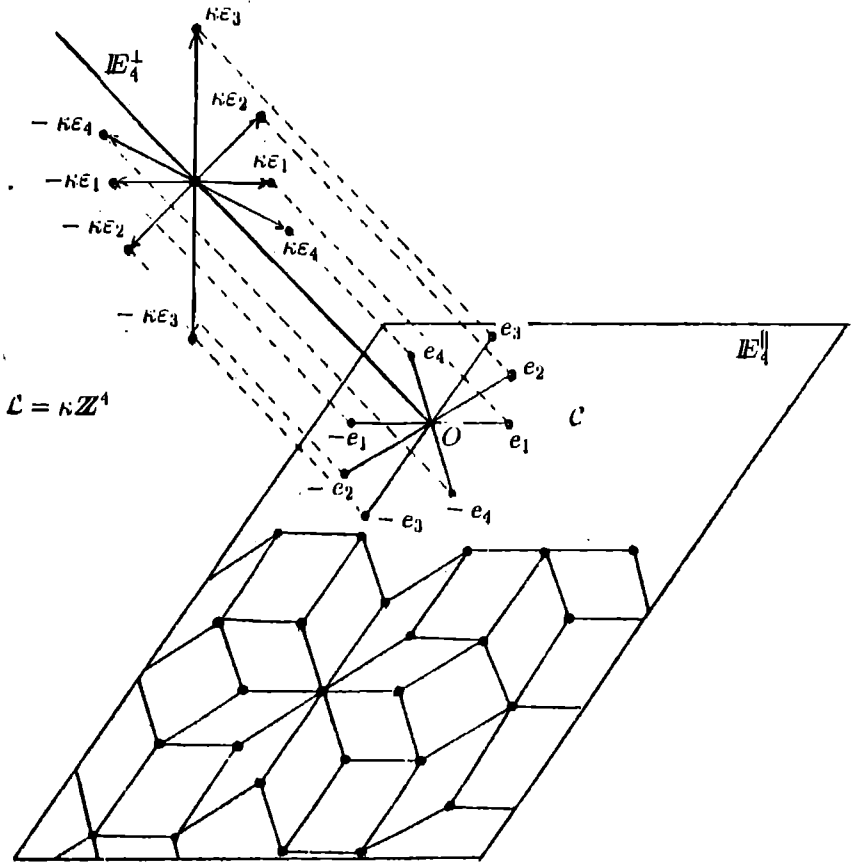
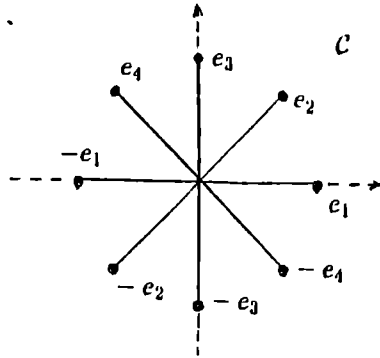


Fig. 12. Descompunerea $E_4 = E_4^1 \oplus E_4^2$ definit de D_8 -sistemul de puncte $D_8(1,0)$ și pavajul octogonal.

Dintre mulțimile model ce pot fi obținute utilizând schema de proiecție $(\mathbb{E}_4^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_4^{\perp}, \mathcal{L})$ le vom analiza în continuare doar pe cele obținute utilizând o fereastră de selecție Ω care satisface următoarele trei condiții [Vog]:

- interiorul lui Ω este proiecția $\pi^{\perp} ((-\vartheta, \vartheta)^4)$ a hipercubului deschis $(-\vartheta, \vartheta)^4$, unde $\vartheta = \kappa/2 = 1/\sqrt{2}$,
- închiderea lui Ω este proiecția $\pi^{\perp} ([-\vartheta, \vartheta]^4)$ a hipercubului închis $[-\vartheta, \vartheta]^4$,
- din fiecare pereche de puncte opuse ale frontierei lui Ω unul singur aparține lui Ω .

Se constată ușor că în acest caz

$$\|x^{\perp}\| < \vartheta \implies x^{\perp} \in \Omega \quad x^{\perp} \in \Omega \implies \|x^{\perp}\| < 2\vartheta.$$

Aceste relații care vor fi utile în determinarea unora dintre autosimilaritățile mulțimii model

$$(7.1) \quad Q = \left\{ x^{\parallel} \mid x \in \mathcal{L}, x^{\perp} \in \Omega \right\}$$

corespunzătoare pavajului octogonal reprezentat schematic în Fig. 12.

Dacă constantele $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$ și $\lambda_1 \in (-1, 1]$ sunt astfel încât matricea

$$M = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda_1\pi^{\perp} = \Theta((\lambda + \lambda_1)/2, (\lambda - \lambda_1)/(2\sqrt{2}))$$

să aibă elemente întregi, atunci

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ x^{\perp} \in \Omega \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Mx \in \mathcal{L} \\ (Mx)^{\perp} = \lambda_1 x^{\perp} \in \Omega. \end{array} \right.$$

În acest caz, omotetia $r \mapsto \lambda r$ lasă invariantă mulțimea model Q deoarece $x^{\parallel} \in Q \implies \lambda x^{\parallel} \in Q$.

Elementele matricei M sunt întregi dacă și numai dacă numerele $j = (\lambda + \lambda_1)/2$ și $l = (\lambda - \lambda_1)/(2\sqrt{2})$ sunt întregi. Deoarece $\lambda = j + l\sqrt{2}$ și $\lambda_1 = j - l\sqrt{2}$, este convenabilă utilizarea transformării

$$(7.2) \quad * : \mathbb{Z}[\sqrt{2}] \longrightarrow \mathbb{Z}[\sqrt{2}] : \lambda \mapsto \lambda^*$$

definite de relația $(j + l\sqrt{2})^* = j - l\sqrt{2}$. Oricare ar fi $\lambda \neq 0$ aparținând mulțimii (care este o mulțime model unidimensională)

$$(7.3) \quad \Lambda = \left\{ \lambda = j + l\sqrt{2} \mid (j, l) \in \mathbb{Z}^2, -1 < \lambda^* \leq 1 \right\}$$

mulțimea Q este invariantă față de omotetia $r \mapsto \lambda r$, adică, $q \in Q \implies \lambda q \in Q$. Printre elementele lui Λ se află factorul de inflație $\lambda = 1 + \sqrt{2}$, menționat frecvent în articolele referitoare la pavajul octogonal.

Fie $\lambda \neq 0$ o constantă aparținând lui Λ astfel încât $|\lambda^*| < 1/2$, și fie $M_{\lambda} = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda^*\pi^{\perp}$. Deoarece $\pi^{\perp}(\mathcal{L})$ este densă în \mathbb{E}_4^{\perp} rezultă că mulțimea

$$\mathcal{L}_{\lambda} = \left\{ y \mid y \in \mathcal{L}, \|y^{\perp}\| < \vartheta(1 - 2|\lambda^*|)/(1 + |\lambda^*|) \right\}$$

este infinită.

Oricare ar fi $x \in \mathcal{L}$ astfel încât $x^\perp \in \Omega$ și oricare ar fi $y \in \mathcal{L}_\lambda$, avem

$$\begin{aligned} \|(M_\lambda(x-y) + y)^\perp\| &= \|\lambda^*(x^\perp - y^\perp) + y^\perp\| \leq |\lambda^*| \|x^\perp - y^\perp\| + \|y^\perp\| \\ &\leq |\lambda^*| (\|x^\perp\| + \|y^\perp\|) + \|y^\perp\| = |\lambda^*| \|x^\perp\| + (1 + |\lambda^*|) \|y^\perp\| < \vartheta. \end{aligned}$$

Rezultă că

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ x^\perp \in \Omega \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} M_\lambda(x-y) + y \in \mathcal{L} \\ (M_\lambda(x-y) + y)^\perp \in \Omega \end{array} \right.$$

relație din care deducem că

$$x^\parallel \in \mathcal{Q} \implies (M_\lambda(x-y) + y)^\parallel = \lambda(x^\parallel - y^\parallel) + y^\parallel \in \mathcal{Q}.$$

Însă aceasta înseamnă că \mathcal{Q} admite autosimilaritatea

$$\mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_2 : r \mapsto \lambda(r - q) + q$$

oricare ar fi q aparținând mulțimii (care este de asemenea o mulțime model)

$$(7.4) \quad \mathcal{Q}_\lambda = \left\{ y^\parallel \mid y \in \mathcal{L}_\lambda \right\} \subset \mathcal{Q}.$$

7.2 Cuasicristale definite de $D_{12}(1,0)$

Plecând de la D_{12} -sistemul de puncte $D_{12}(1,0)$ se obține o reprezentare a lui D_{12} în \mathbb{E}_6 . În acest caz reprezentarea lui D_{12} în \mathbb{E}_6^\perp este \mathbb{R} -reductibilă, iar $(\mathbb{E}_6^\parallel \oplus \mathbb{E}_6^\perp, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție. Totuși descompunerea $\mathbb{E}_6^\parallel \oplus \mathbb{E}_6^\perp$ ne permite să utilizăm metoda proiecției benzii pentru a defini anumite mulțimi Delaunay. Teorema (6.2.1) poate fi utilizată pentru a determina autosimilaritățile ale mulțimilor astfel definite în cazul în care fereastra de selecție utilizată este o bilă.

Considerăm reprezentarea bidimensională uzuală

$$a(x, y) = (x\sqrt{3}/2 - y/2, x/2 + y\sqrt{3}/2) \quad b(x, y) = (x, -y)$$

a grupului diedral

$$D_{12} = \langle a, b \mid a^{12} = b^2 = (ab)^2 = e \rangle$$

și D_{12} -sistemul de puncte generat de mulțimea $S = \{(1,0)\}$

$$\mathcal{C} = D_{12}(1,0) = \{e_1, e_2, \dots, e_6, -e_1, -e_2, \dots, -e_6\}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (1,0) & e_2 &= (\sqrt{3}/2, 1/2) & e_3 &= (1/2, \sqrt{3}/2) \\ e_4 &= (0,1) & e_5 &= (-1/2, \sqrt{3}/2) & e_6 &= (-\sqrt{3}/2, 1/2). \end{aligned}$$

Acțiunea generatorilor grupului D_{12} pe mulțimea C poate fi descrisă de transformările

$$a = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & -e_1 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_1 & -e_6 & -e_5 & -e_4 & -e_3 & -e_2 \end{pmatrix}.$$

Relațiile corespunzătoare

$$a = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & -\varepsilon_1 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_1 & -\varepsilon_6 & -\varepsilon_5 & -\varepsilon_4 & -\varepsilon_3 & -\varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

unde $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$, ..., $\varepsilon_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$, definesc reprezentarea ortogonală

$$a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (-x_6, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$$

$$b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (x_1, -x_6, -x_5, -x_4, -x_3, -x_2)$$

a lui D_{12} în \mathbb{E}_6 .

Vectorii

$$w_1 = (1, \sqrt{3}/2, 1/2, 0, -1/2, -\sqrt{3}/2) \quad w_2 = (0, 1/2, \sqrt{3}/2, 1, \sqrt{3}/2, 1/2)$$

formează o bază ortogonală a subspațiului D_{12} -invariant

$$\mathbb{E}_6^{\parallel} = \{(\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_6 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_2\}.$$

În plus, $\|w_1\| = \|w_2\|$, și vectorii

$$v_1 = \rho w_1 \quad v_2 = \rho w_2$$

unde $\rho = 1/\|w_1\| = 1/\sqrt{3}$, formează o bază ortonormată a subspațiului \mathbb{E}_6^{\parallel} .

Izometria

$$\Xi: \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel}: r \mapsto (\rho \langle r, e_1 \rangle, \rho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \rho \langle r, e_6 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale lui D_6 astfel încât $\Xi u_1 = v_1$, $\Xi u_2 = v_2$, ne permite să identificăm cele două spații.

Utilizând tabelul de caractere [Jns] al lui D_{12}

	e	a	a^2	a^3	a^4	a^5	a^6	b	ab
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
Γ_4	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1
Γ_5	2	$\sqrt{3}$	1	0	-1	$-\sqrt{3}$	-2	0	0
Γ_6	2	1	-1	-2	-1	1	2	0	0
Γ_7	2	0	-2	0	2	0	-2	0	0
Γ_8	2	-1	-1	2	-1	-1	2	0	0
Γ_9	2	$-\sqrt{3}$	1	0	-1	$\sqrt{3}$	-2	0	0

obținem că reprezentarea lui D_{12} în \mathbb{E}_6 pe care am definit-o este o sumă directă de trei reprezentări ireductibile. Proiectorii corespunzători pot fi obținuți cu ajutorul metodei uzuale [Ser, Nai] de descompunere a reprezentării unui grup finit în componentele sale ireductibile. Ei sunt

$$\begin{aligned}\pi^{\parallel} &= \Theta(1/3, \sqrt{3}/6, 1/6) \\ \pi_1^{\perp} &= \Theta(1/3, -\sqrt{3}/6, 1/6) \\ \pi_2^{\perp} &= \Theta(1/3, 0, -1/3)\end{aligned}$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma & 0 & -\gamma & -\beta \\ \beta & \alpha & \beta & \gamma & 0 & -\gamma \\ \gamma & \beta & \alpha & \beta & \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & \beta & \alpha & \beta & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & \beta & \alpha & \beta \\ -\beta & -\gamma & 0 & \gamma & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Fie $\pi^{\perp} = \pi_1^{\perp} + \pi_2^{\perp}$, $\kappa = 1/\rho$ și fie $\mathcal{L} = \kappa\mathbb{Z}^6$. Perechea $(\mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece restricția lui π^{\parallel} la \mathcal{L} nu este injectivă. De exemplu,

$$\pi^{\parallel}(-\kappa, 0, \kappa, 0, -\kappa, 0) = 0.$$

Vom determina în continuare anumite autosimilarități ale cuasicristalului

$$\mathcal{Q} = \left\{ \pi^{\parallel}x \mid x \in \mathcal{L}, \|\pi^{\perp}x\| < \vartheta \right\}$$

definit utilizând ca fereastră de selecție bila cu centrul în origine de rază $\vartheta > 0$. Dacă constantele $\lambda \in \mathbb{R} - \{0\}$ și $\lambda_1, \lambda_2 \in [-1, 1]$ sunt astfel încât elementele matricei $M = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda_1\pi_1^{\perp} + \lambda_2\pi_2^{\perp}$ sunt întregi, atunci

$$\|\pi^{\perp}(Mx)\|^2 = \lambda_1^2\|\pi_1^{\perp}x\|^2 + \lambda_2^2\|\pi_2^{\perp}x\|^2 \leq \|\pi_1^{\perp}x\|^2 + \|\pi_2^{\perp}x\|^2 = \|\pi^{\perp}x\|^2$$

și prin urmare

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp}x\| < \vartheta \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Mx \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp}(Mx)\| < \vartheta. \end{array} \right.$$

În acest caz, $\pi^{\parallel}x \in \mathcal{Q} \implies \pi^{\parallel}(Mx) = \lambda\pi^{\parallel}x \in \mathcal{Q}$, adică, \mathcal{Q} este invariant în raport cu omotetia $r \mapsto \lambda r$.

Elementele matricei

$$M = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda_1\pi_1^{\perp} + \lambda_2\pi_2^{\perp} = \Theta((\lambda + \lambda_1 + \lambda_2)/3, (\lambda - \lambda_1)\sqrt{3}/6, (\lambda + \lambda_1)/6 - \lambda_2/3)$$

sunt întregi dacă și numai dacă numerele

$$\begin{aligned}j &= (\lambda + \lambda_1 + \lambda_2)/3 \\ l &= (\lambda - \lambda_1)\sqrt{3}/6 \\ m &= (\lambda + \lambda_1)/6 - \lambda_2/3\end{aligned}$$

sunt întregi. Deoarece $\lambda_2 = j - 2m$ rezultă că λ_2 este întreg, și deci $|\lambda_2| \leq 1 \implies j - 2m \in \{-1, 0, 1\}$. Ținând seama de relațiile

$$\lambda = j + l\sqrt{3} + m \quad \lambda_1 = j - l\sqrt{3} + m$$

obținem că mulțimea \mathcal{Q} este invariantă în raport cu omotetia $r \mapsto \lambda r$ oricare ar fi λ aparținând reuniunii

$$\begin{aligned} & \{3m + l\sqrt{3} - 1 \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |3m - l\sqrt{3} - 1| \leq 1\} \\ & \cup \{3m + l\sqrt{3} \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |3m - l\sqrt{3}| \leq 1\} \\ & \cup \{3m + l\sqrt{3} + 1 \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |3m - l\sqrt{3} + 1| \leq 1\}. \end{aligned}$$

7.3 Cuasicristale definite de $Y(1, 0, \tau)$

Un rol central în înțelegerea structurii cuasicristalelor l-a avut încă de la descoperirea lor pavajul Penrose tridimensional. Componentele acestui pavaj sunt poliedrele lui Ammann și el a fost obținut de Kramer și Neri în 1984. Denumirea a fost sugerată de asemănarea cu un pavaj aperiodic al planului obținut anterior de Penrose. Mulțimea nodurilor pavajului Penrose tridimensional se obține prin algoritmul dezvoltat în capitolele anterioare plecând de la Y -sistemul de puncte generat de $S = \{(1, 0, \tau)\}$. Vom prezenta această construcție și vom determina unele dintre autosimilaritățile acestui model.

Considerăm reprezentarea uzuală

$$(7.5) \quad \begin{aligned} a(x, y, z) &= \left(\frac{1}{2}x - \frac{\tau}{2}y + \frac{\tau-1}{2}z, \frac{\tau}{2}x + \frac{\tau-1}{2}y - \frac{1}{2}z, \frac{\tau-1}{2}x + \frac{1}{2}y + \frac{\tau}{2}z\right) \\ b(x, y, z) &= (-x, -y, z) \end{aligned}$$

a grupului icosaedrelui

$$Y = 235 = \langle a, b \mid a^5 = b^2 = (ab)^3 = e \rangle$$

și Y -sistemul de puncte generat de mulțimea $S = \{(1, 0, \tau)\}$

$$\mathcal{C} = Y(1, 0, \tau) = \{e_1, e_2, \dots, e_6, -e_1, -e_2, \dots, -e_6\}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (1, 0, \tau) & e_2 &= (\tau, -1, 0) & e_3 &= (\tau, 1, 0) \\ e_4 &= (0, \tau, 1) & e_5 &= (-1, 0, \tau) & e_6 &= (0, -\tau, 1). \end{aligned}$$

Acțiunea generatorilor lui Y pe \mathcal{C} poate fi descrisă de

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_1 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & e_2 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_5 & e_6 & e_3 & e_6 & e_1 & e_4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

și transformările corespunzătoare $a, b : \mathbb{E}_6 \longrightarrow \mathbb{E}_6$

$$a = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_1 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_5 & -\varepsilon_2 & -\varepsilon_3 & \varepsilon_6 & \varepsilon_1 & \varepsilon_4 \end{pmatrix}$$

unde $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$, ..., $\varepsilon_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$ este baza canonică a lui \mathbb{E}_6 , definesc reprezentarea ortogonală a lui Y în \mathbb{E}_6

$$a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (x_1, x_6, x_2, x_3, x_4, x_5)$$

$$b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = (x_5, -x_2, -x_3, x_6, x_1, x_4).$$

Conform teoriei generale, subspațiul

$$\mathbb{E}_6^{\parallel} = \{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_6 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_3 \}$$

al lui \mathbb{E}_6 este Y -invariant. Vectorii $v_1 = \rho w_1$, $v_2 = \rho w_2$, $v_3 = \rho w_3$, unde

$$w_1 = (1, 0, \tau, -1, \tau, 0)$$

$$w_2 = (0, \tau, -1, 0, 1, -\tau)$$

$$w_3 = (\tau, 1, 0, \tau, 0, 1)$$

$\rho = 1/\|w_1\| = 1/\sqrt{5 + \sqrt{5}}$, formează o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_6^{\parallel} , și izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel} : r \mapsto (\rho \langle r, e_1 \rangle, \rho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \rho \langle r, e_6 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale lui Y astfel încât $\Xi(1, 0, 0) = v_1$, $\Xi(0, 1, 0) = v_2$, $\Xi(0, 0, 1) = v_3$ ne permite să identificăm spațiul fizic \mathbb{E}_3 cu \mathbb{E}_6^{\parallel} .

Deoarece transformarea

$$\sigma = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ -e_1 & e_2 & e_4 & e_6 & e_3 & e_5 \end{pmatrix}$$

satisface relațiile

$$\sigma a \sigma^{-1} = a^2 \quad \sigma b \sigma^{-1} = (ab)^2 bab$$

avem $\sigma Y \sigma^{-1} = Y$. Conform teoremei (5.4.1), subspațiul

$$\mathbb{E}_6^{\sigma} = \{ \langle r, \sigma e_1 \rangle, \langle r, \sigma e_2 \rangle, \dots, \langle r, \sigma e_6 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_3 \}$$

este Y -invariant și admite baza ortogonală

$$\{ (-1, \tau, 0, 0, \tau, -1), (0, -1, \tau, -\tau, 1, 0), (-\tau, 0, 1, 1, 0, \tau) \}.$$

În plus, subspațiul \mathbb{E}_6^{σ} coincide cu ortogonalul lui \mathbb{E}_6^{\parallel}

$$\mathbb{E}_6^{\perp} = \left\{ x \in \mathbb{E}_6 \mid \langle x, y \rangle = 0 \text{ oicare ar fi } y \in \mathbb{E}_6^{\parallel} \right\}$$

$$= \left\{ (x_1, x_2, \dots, x_6) \in \mathbb{E}_6 \mid \sum_{j=1}^6 x_j e_j = 0 \right\}.$$

Proiectorii ortogonali corespunzători descompunerii $\mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}$ sunt

$$\pi^{\parallel} = \Theta(1/2, \sqrt{5}/10) \quad \pi^{\perp} = \Theta(1/2, -\sqrt{5}/10)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta & \beta & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & -\beta & -\beta & \beta \\ \beta & \beta & \alpha & \beta & -\beta & -\beta \\ \beta & -\beta & \beta & \alpha & \beta & -\beta \\ \beta & -\beta & -\beta & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & -\beta & -\beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Ei satisfac relațiile

$$\begin{aligned} \pi^{\parallel} \circ \pi^{\parallel} &= \pi^{\parallel} & \pi^{\perp} \circ \pi^{\perp} &= \pi^{\perp} \\ \pi^{\parallel} \circ \pi^{\perp} &= \pi^{\perp} \circ \pi^{\parallel} = 0 & \pi^{\parallel} + \pi^{\perp} &= 1 \\ \pi^{\parallel}(\kappa \varepsilon_j) &= e_j & \text{oricare ar fi } j &\in \{1, 2, \dots, 6\} \end{aligned}$$

unde $\kappa = 1/\varrho = \sqrt{5 + \sqrt{5}}$.

Fiecare element $x \in \mathbb{E}_6$ se poate scrie sub forma

$$x = x^{\parallel} + x^{\perp}$$

astfel încât $x^{\parallel} \in \mathbb{E}_6^{\parallel}$ și $x^{\perp} \in \mathbb{E}_6^{\perp}$. Elementele x^{\parallel} , x^{\perp} satisfăcând această condiție sunt unic determinate și sunt date de relațiile $x^{\parallel} = \pi^{\parallel}x$, $x^{\perp} = \pi^{\perp}x$.

Utilizând rețeaua $\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^6$ obținem schema de proiectie $(\mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}, \mathcal{L})$.

Fie $\vartheta = \kappa/2$, și fie Ω o mulțime (numită *triacontaedru*) care verifică relațiile [Vog]

$$\pi^{\perp} \left((-\vartheta, \vartheta)^6 \right) \subset \Omega \subset \pi^{\perp} \left([-\vartheta, \vartheta]^6 \right)$$

și este astfel încât din fiecare pereche de puncte opuse ale frontierei conține unul și numai unul dintre ele.

Putem remarca imediat că

$$\|x^{\perp}\| < \vartheta \implies x^{\perp} \in \Omega \quad x^{\perp} \in \Omega \implies \|x^{\perp}\| < \vartheta\sqrt{6}.$$

Mulțimea model

$$(7.6) \quad Q = \left\{ x^{\parallel} \mid x \in \mathcal{L}, x^{\perp} \in \Omega \right\}$$

coincide cu mulțimea nodurilor *pavajului Penrose tridimensional* [Vog]. Vom determina în continuare unele dintre autosimilaritățile ei.

Elementele matricei $M = \lambda \pi^{\parallel} + \lambda_1 \pi^{\perp} = \Theta((\lambda + \lambda_1)/2, (\lambda - \lambda_1)\sqrt{5}/10)$ sunt întregi dacă și numai dacă numerele $j = (\lambda + \lambda_1)/2$, $l = (\lambda - \lambda_1)\sqrt{5}/10$ sunt întregi. Mulțimea Q este lăsată invariantă de omotetia $\mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3 : r \mapsto \lambda r$ oricare ar fi $\lambda \neq 0$ aparținând mulțimii (care este de asemenea o mulțime model unidimensională)

$$\Lambda = \left\{ \lambda = j + l\sqrt{5} \mid (j, l) \in \mathbb{Z}^2, -1 < \lambda^* \leq 1 \right\}$$

unde $(j + l\sqrt{5})^* = j - l\sqrt{5}$.

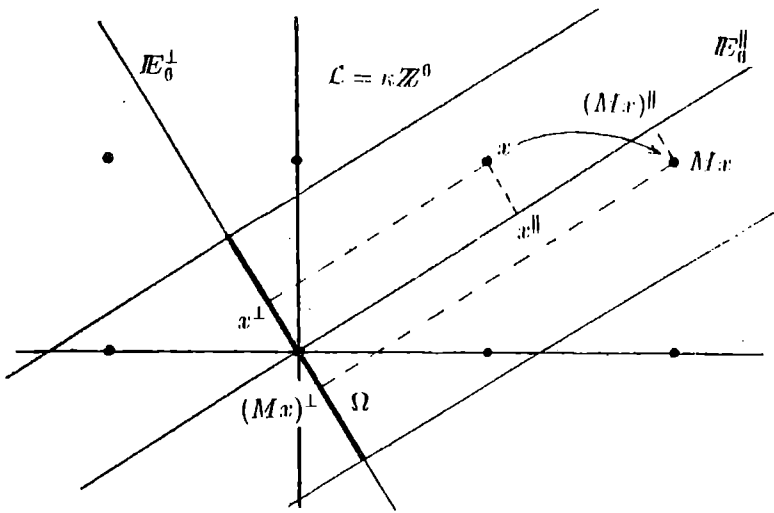


Fig. 13. Pavaul Penrose admite o infinitate de constante de inflație independente.

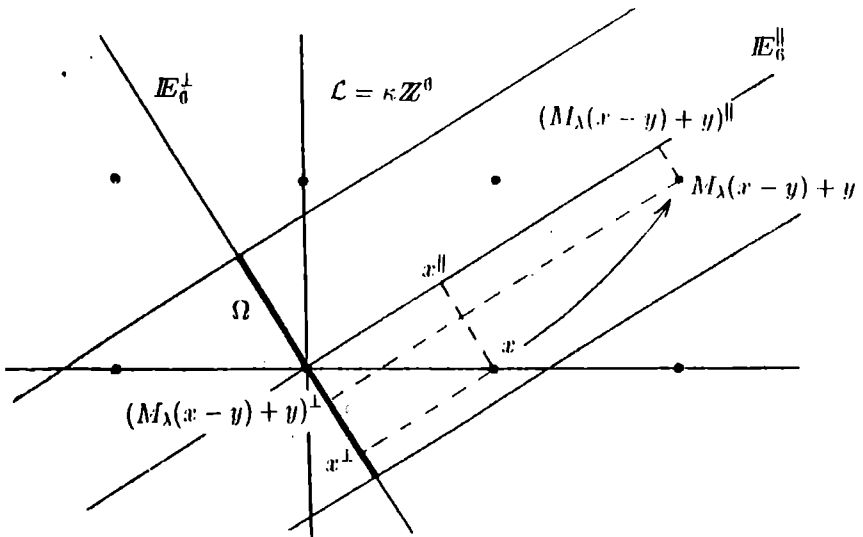


Fig. 14. Pavaul Penrose admite o infinitate de centre de inflație.

Într-adevăr, dacă $\lambda \in \Lambda$, atunci (Fig. 13)

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ x^\perp \in \Omega \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Mx \in \mathcal{L} \\ (Mx)^\perp \in \Omega \end{array} \right.$$

și deci

$$x^\parallel \in \mathcal{Q} \implies (Mx)^\parallel = \lambda x^\parallel \in \mathcal{Q}.$$

Printre elementele lui Λ se află factorul de inflație al pavajului Penrose bine-cunoscut $\tau^3 = 2 + \sqrt{5}$.

Fie $\lambda \in \Lambda - \{0\}$ astfel încât $|\lambda^*| < 1/\sqrt{6}$, $\vartheta_0 = (1 - |\lambda^*|\sqrt{6})\vartheta/(1 + |\lambda^*|)$ și fie $M_\lambda = \lambda\pi^\parallel + \lambda^*\pi^\perp$. Deoarece $\pi^\perp(\mathcal{L})$ este dens în \mathbb{E}_6^\perp , mulțimea

$$\mathcal{L}_\lambda = \left\{ y \in \mathcal{L} \mid \|y^\perp\| < \vartheta_0 \right\}$$

este infinită. Oricare ar fi $y \in \mathcal{L}_\lambda$ și oricare ar fi $x \in \mathcal{L}$ astfel încât $x^\perp \in \Omega$, obținem (Fig. 14)

$$\begin{aligned} \|(M_\lambda(x - y) + y)^\perp\| &= \|\lambda^*(x^\perp - y^\perp) + y^\perp\| \leq |\lambda^*| \|x^\perp - y^\perp\| + \|y^\perp\| \\ &\leq |\lambda^*|(\|x^\perp\| + \|y^\perp\|) + \|y^\perp\| < |\lambda^*|\sqrt{6}\vartheta + (|\lambda^*| + 1)\vartheta_0 = \vartheta \end{aligned}$$

relații care arată că $(M_\lambda(x - y) + y)^\perp \in \Omega$. Rezultă că

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ x^\perp \in \Omega \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} M_\lambda(x - y) + y \in \mathcal{L} \\ (M_\lambda(x - y) + y)^\perp \in \Omega \end{array} \right.$$

oricare ar fi $y \in \mathcal{L}_\lambda$, și prin urmare

$$x^\parallel \in \mathcal{Q} \implies (M_\lambda(x - y) + y)^\parallel = \tau^3(x^\parallel - y^\parallel) + y^\parallel \in \mathcal{Q}$$

oricare ar fi $y \in \mathcal{L}_\lambda$. Aceasta înseamnă că mulțimea model \mathcal{Q} este lăsată invariantă de transformarea afină

$$\mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 : r \mapsto \tau^3(r - q) + q$$

oricare ar fi q aparținând mulțimii (care este de asemenea o mulțime model)

$$\mathcal{Q}_\lambda = \left\{ y^\parallel \mid y \in \mathcal{L}_\lambda \right\}.$$

7.4 Cuasicristale definite de $Y(1 + \tau, 1 + \tau, 1 + \tau)$

În paragraful anterior am obținut plecând de la Y -sistemul de puncte $Y(1, 0, \tau)$ o schema de proiecție, dar acest lucru nu se întâmplă în general. Avem însă posibilitatea utilizării metodei proiecției benzii și a utilizării teoremei (6.2.1) pentru determinarea unor autosimilarități.

Punctele Y -sistemului generat de mulțimea $S = \{(\tau + 1, \tau + 1, \tau + 1)\}$

$$C = Y(\tau + 1, \tau + 1, \tau + 1) = \{e_1, \dots, e_{10}, -e_1, \dots, -e_{10}\}$$

unde

$$\begin{array}{ll} e_1 = (\tau + 1, \tau + 1, \tau + 1) & e_6 = (0, -\tau, 2\tau + 1) \\ e_2 = (-\tau - 1, \tau + 1, \tau + 1) & e_7 = (\tau, 2\tau + 1, 0) \\ e_3 = (\tau + 1, -\tau - 1, \tau + 1) & e_8 = (-\tau, 2\tau + 1, 0) \\ e_4 = (\tau + 1, \tau + 1, -\tau - 1) & e_9 = (2\tau + 1, 0, \tau) \\ e_5 = (0, \tau, 2\tau + 1) & e_{10} = (2\tau + 1, 0, -\tau). \end{array}$$

sunt vârfurile unui dodecaedru regulat.

Acțiunea generatorilor lui Y pe C este descrisă de

$$a = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & e_7 & e_8 & e_9 & e_{10} \\ e_5 & -e_4 & e_9 & e_8 & e_6 & e_3 & e_2 & -e_{10} & e_1 & e_7 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 & e_7 & e_8 & e_9 & e_{10} \\ -e_4 & e_3 & e_2 & -e_1 & e_6 & e_5 & -e_7 & -e_8 & -e_{10} & -e_9 \end{pmatrix}.$$

Transformările corespunzătoare $a, b : \mathbb{E}_{10} \rightarrow \mathbb{E}_{10}$

$$a = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & \varepsilon_7 & \varepsilon_8 & \varepsilon_9 & \varepsilon_{10} \\ \varepsilon_5 & -\varepsilon_4 & \varepsilon_9 & \varepsilon_8 & \varepsilon_6 & \varepsilon_3 & \varepsilon_2 & -\varepsilon_{10} & \varepsilon_1 & \varepsilon_7 \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & \varepsilon_7 & \varepsilon_8 & \varepsilon_9 & \varepsilon_{10} \\ -\varepsilon_4 & \varepsilon_3 & \varepsilon_2 & -\varepsilon_1 & \varepsilon_6 & \varepsilon_5 & -\varepsilon_7 & -\varepsilon_8 & -\varepsilon_{10} & -\varepsilon_9 \end{pmatrix}$$

unde $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{10}$ este baza canonică a lui \mathbb{E}_{10} , definesc reprezentarea

$$a(x_1, x_2, \dots, x_{10}) = (x_9, x_7, x_6, -x_2, x_1, x_5, x_{10}, x_4, x_3, -x_8)$$

$$b(x_1, x_2, \dots, x_{10}) = (-x_4, x_3, x_2, -x_1, x_6, x_5, -x_7, -x_8, -x_{10}, -x_9)$$

a lui Y în \mathbb{E}_{10} .

Subspațiul

$$\mathbb{E}_{10}^{\parallel} = \left\{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_{10} \rangle \mid r \in \mathbb{E}_3 \right\}$$

generat de vectorii

$$\begin{array}{l} w_1 = (\tau + 1, -\tau - 1, \tau + 1, \tau + 1, 0, 0, \tau, -\tau, 2\tau + 1, 2\tau + 1) \\ w_2 = (\tau + 1, \tau + 1, -\tau - 1, \tau + 1, \tau, -\tau, 2\tau + 1, 2\tau + 1, 0, 0) \\ w_3 = (\tau + 1, \tau + 1, \tau + 1, -\tau - 1, 2\tau + 1, 2\tau + 1, 0, 0, \tau, -\tau) \end{array}$$

este un subspațiu Y -invariant al lui \mathbb{E}_{10} . El admite baza ortonormată $v_1 = \varrho w_1$, $v_2 = \varrho w_2$, $v_3 = \varrho w_3$, unde $\varrho = 1/\|w_1\| = 1/((\tau + 1)\sqrt{10})$.

Izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_{10}^{\parallel} : r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_{10} \rangle)$$

cu proprietatea că $\Xi(1, 0, 0) = v_1$, $\Xi(0, 1, 0) = v_2$, $\Xi(0, 0, 1) = v_3$ ne permite să identificăm spațiul "fizic" \mathbb{E}_3 cu $\mathbb{E}_{10}^{\parallel}$.

Fie $\kappa = 1/\varrho$, $\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^{10}$ și fie $\vartheta \in (\kappa, \infty)$. Vom nota cu \mathbb{E}_{10}^{\perp} ortogonalul lui $\mathbb{E}_{10}^{\parallel}$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{10}^{\perp} &= \left\{ x \in \mathbb{E}_{10} \mid \langle x, y \rangle = 0 \text{ oricare ar fi } y \in \mathbb{E}_{10}^{\parallel} \right\} \\ &= \left\{ (x_1, x_2, \dots, x_{10}) \in \mathbb{E}_{10} \mid \sum_{j=1}^{10} x_j e_j = 0 \right\} \end{aligned}$$

și cu $\pi^{\perp} = 1 - \pi^{\parallel}$ proiectorul ortogonal corespunzător.

În acest caz $(\mathbb{E}_{10}^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_{10}^{\perp}, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece restricția lui π^{\parallel} la \mathcal{L} nu este injectivă. Într-adevăr, $\pi^{\parallel} x = 0$ oricare ar fi $x = (x_1, x_2, x_3, x_4, 0, 0, 0, 0, 0, 0) \in \mathcal{L}$ astfel încât $x_1 = -x_2 = -x_3 = -x_4$.

Definim utilizând metoda proiecției benzii mulțimea Delaunay

$$(7.7) \quad Q = \left\{ \pi^{\parallel} x \mid x \in \mathcal{L}, \|\pi^{\perp} x\| < \vartheta \right\}.$$

Fereastra de selecție utilizată este bila centrată în originea lui \mathbb{E}_{10}^{\perp} de rază $\vartheta \in (0, \infty)$.

Deoarece, în virtutea identificării $\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_{10}^{\parallel}$ avem

$$\pi^{\parallel}(\kappa e_j) = e_j$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, 10\}$, obținem că "vecinii aritmetici" ai fiecărui punct $r \in Q$ aparțin translației $r + \mathcal{C}$ a lui \mathcal{C} , și deci mulțimea Q poate fi privită ca fiind o reuniune infinită de translații parțial ocupate ale lui \mathcal{C} care se interpenetrează.

Pentru a determina unele dintre autosimilaritățile lui Q descompunem reprezentarea lui Y în \mathbb{E}_{10} în componentele sale ireductibile. Conform tabelii de caractere a lui Y

	1 e	12 a	15 b	20 ab	12 a ²
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	3	τ	-1	0	τ'
Γ_3	3	τ'	-1	0	τ
Γ_4	4	-1	0	1	-1
Γ_5	5	0	1	-1	0

unde $\tau' = (1 - \sqrt{5})/2$, caracterul reprezentării noastre

$$\Gamma \quad \begin{matrix} c & a & b & ab & a^2 \\ 10 & 0 & -2 & 1 & 0 \end{matrix}$$

este o sumă de caractere ireductibile

$$\Gamma = \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4.$$

Prin urmare, \mathbb{E}_{10}^\perp este suma a două subspații Y -invariante ortogonale

$$\mathbb{E}_{10}^\perp = \mathbb{E}_{10}^{\perp,1} \oplus \mathbb{E}_{10}^{\perp,2}$$

și π^\perp este suma proiectoarelor ortogonale corespunzătoare

$$\pi^\perp = \pi_1^\perp + \pi_2^\perp.$$

Subspațiul V al lui \mathbb{E}_{10} generat de mulțimea Y -invariantă

$$\left\{ g(1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 0) \mid g \in Y \right\} = \{z_1, z_2, \dots, z_8, -z_1, -z_2, \dots, -z_8\}$$

unde

$$\begin{aligned} z_1 &= (1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 0) & z_4 &= (1, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 1) \\ z_2 &= (0, 0, 1, -1, 0, 1, -1, -1, 0, 0) & z_6 &= (1, 1, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 0) \\ z_3 &= (0, -1, 1, 0, 0, 0, 0, -1, 1, 1) & z_8 &= (0, 1, 0, -1, 1, 1, 0, 0, 0, -1) \end{aligned}$$

este un subspațiu Y -invariant al lui \mathbb{E}_{10} , și ortogonalul lui, notat V^\perp , este un subspațiu Y -invariant de dimensiune 4. Prin urmare, putem alege

$$\mathbb{E}_{10}^{\perp,2} = V^\perp$$

și, prin calcul direct, obținem

$$\begin{aligned} \pi^\parallel &= \Theta(3/10, 1/10, \sqrt{5}/10) \\ \pi_1^\perp &= \Theta(3/10, 1/10, -\sqrt{5}/10) \\ \pi_2^\perp &= \Theta(2/5, -1/5, 0) \end{aligned}$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta & \beta & \gamma & \beta & \gamma & \beta & \gamma & \beta \\ \beta & \alpha & -\beta & -\beta & \gamma & \beta & \beta & \gamma & -\beta & -\gamma \\ \beta & -\beta & \alpha & -\beta & \beta & \gamma & -\beta & -\gamma & \gamma & \beta \\ \beta & -\beta & -\beta & \alpha & -\beta & -\gamma & \gamma & \beta & \beta & \gamma \\ \gamma & \gamma & \beta & -\beta & \alpha & \gamma & \beta & \beta & \beta & -\beta \\ \beta & \beta & \gamma & -\gamma & \gamma & \alpha & -\beta & -\beta & \beta & -\beta \\ \gamma & \beta & -\beta & \gamma & \beta & -\beta & \alpha & \gamma & \beta & \beta \\ \beta & \gamma & -\gamma & \beta & \beta & -\beta & \gamma & \alpha & -\beta & -\beta \\ \gamma & -\beta & \gamma & \beta & \beta & \beta & \beta & -\beta & \alpha & \gamma \\ \beta & -\gamma & \beta & \gamma & -\beta & -\beta & \beta & -\beta & \gamma & \alpha \end{pmatrix}$$

Fie $\lambda, \lambda_1, \lambda_2$ trei parametri reali satisfacând relațiile

$$\lambda \neq 0 \quad |\lambda_1| \leq 1 \quad |\lambda_2| \leq 1$$

și astfel încât elementele matricei

$$M = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda_1\pi_1^{\perp} + \lambda_2\pi_2^{\perp}$$

să fie întregi. Deoarece

$$\|\pi^{\perp}(Mx)\|^2 = \|\lambda_1\pi_1^{\perp}x\|^2 + \|\lambda_2\pi_2^{\perp}x\|^2 \leq \|\pi_1^{\perp}x\|^2 + \|\pi_2^{\perp}x\|^2 = \|\pi^{\perp}x\|^2$$

și elementele matricei M sunt întregi, rezultă că

$$\left. \begin{array}{l} x \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp}x\| < \vartheta \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} Mx \in \mathcal{L} \\ \|\pi^{\perp}(Mx)\| < \vartheta \end{array} \right.$$

și prin urmare $\lambda\mathcal{Q} \subset \mathcal{Q}$. Aceasta înseamnă că \mathcal{Q} este lăsat invariant de omotetia

$$\mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 : r \mapsto \lambda r.$$

Elementele matricei $M = \lambda\pi^{\parallel} + \lambda_1\pi_1^{\perp} + \lambda_2\pi_2^{\perp}$ sunt întregi dacă și numai dacă

$$\begin{aligned} j &= \frac{3}{10}(\lambda + \lambda_1) + \frac{2}{5}\lambda_2 \\ l &= \frac{1}{10}(\lambda + \lambda_1) - \frac{1}{5}\lambda_2 \\ m &= (\lambda - \lambda_1)/(2\sqrt{5}) \end{aligned}$$

sunt întregi. Rezultă că $\lambda_2 = j - 3l \in \mathbb{Z}$, și deci $|\lambda_2| \leq 1 \implies j - 3l \in \{-1, 0, 1\}$. Mulțimea \mathcal{Q} este lăsată invariantă de omotetia $r \mapsto \lambda r$ oricare ar fi λ aparținând reuniunii

$$\begin{aligned} &\{5l - 1 + m\sqrt{5} \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |5l - 1 - m\sqrt{5}| \leq 1\} \\ &\cup \{5l + m\sqrt{5} \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |5l - m\sqrt{5}| \leq 1\} \\ &\cup \{5l + 1 + m\sqrt{5} \mid (l, m) \in \mathbb{Z}^2, |5l + 1 - m\sqrt{5}| \leq 1\}. \end{aligned}$$

7.5 Cuasicristale definite de $D_4\{(1, 0), (2^{1/2}, 1)\}$

În fiecare dintre exemplele anterioare G -sistemul de puncte utilizat ca element inițial a fost format din punctele unei singure orbite. În acest paragraf vom prezenta un exemplu obținut plecând de la un D_4 -sistem de puncte rezultat reunind două orbite ale lui D_4 . Totodată acest exemplu arată că în unele cazuri nu se obține nici o autosimilaritate utilizând metodele prezentate în paragrafele anterioare. Este posibil să nu existe autosimilarități netriviiale sau să existe autosimilarități care nu se pot obține prin metodele indicate.

Fie reprezentarea uzuală

$$a(x, y) = (-y, x) \quad b(x, y) = (x, -y)$$

a grupului diedral

$$D_4 = \langle a, b \mid a^4, b^2, (ab)^2 \rangle$$

și fie D_4 -sistemul de puncte generat de mulțimea (Fig. 15) $S = \{(1,0), (\sqrt{2}, 1)\}$

$$\mathcal{C} = D_4\{(1,0), (\sqrt{2}, 1)\} = D_4(1,0) \cup D_4(\sqrt{2}, 1) = \{e_1, e_2, \dots, e_6, -e_1, -e_2, \dots, -e_6\}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (1, 0) & e_3 &= (\sqrt{2}, 1) & e_5 &= (-1, \sqrt{2}) \\ e_2 &= (0, 1) & e_4 &= (1, \sqrt{2}) & e_6 &= (-\sqrt{2}, 1). \end{aligned}$$

Acțiunea generatorilor grupului D_4 pe mulțimea \mathcal{C} este poate fi descrisă prin relațiile

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_2 & -e_1 & e_5 & e_6 & -e_3 & -e_4 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_1 & -e_2 & -e_6 & -e_5 & -e_4 & -e_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Transformările corespunzătoare $a, b : \mathbb{E}_6 \rightarrow \mathbb{E}_6$

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_2 & -\varepsilon_1 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 & -\varepsilon_3 & -\varepsilon_4 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 & \varepsilon_5 & \varepsilon_6 \\ \varepsilon_1 & -\varepsilon_2 & -\varepsilon_6 & -\varepsilon_5 & -\varepsilon_4 & -\varepsilon_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

unde $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$, ..., $\varepsilon_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$ este baza canonică a lui \mathbb{E}_6 , definesc reprezentarea ortogonală a lui D_4 în \mathbb{E}_6

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (-x_2, x_1, -x_5, -x_6, x_3, x_4) \\ b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (x_1, -x_2, -x_6, -x_5, -x_4, -x_3). \end{aligned}$$

Vectorii

$$\begin{aligned} w_1 &= (1, 0, \sqrt{2}, 1, -1, -\sqrt{2}) \\ w_2 &= (0, 1, 1, \sqrt{2}, \sqrt{2}, 1) \end{aligned}$$

formează o bază ortogonală în subspațiul D_4 -invariant

$$\mathbb{E}_6^{\parallel} = \{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_6 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_2 \}$$

astfel încât $\|w_1\| = \|w_2\| = \sqrt{7}$. Vectorii

$$v_1 = \varrho w_1 \quad v_2 = \varrho w_2$$

unde $\varrho = 1/\sqrt{7}$, formează baza ortonormată corespunzătoare în \mathbb{E}_6^{\parallel} , și izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_2 \rightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel} : r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_6 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale lui D_4 astfel încât $\Xi(1, 0) = v_1$ și $\Xi(0, 1) = v_2$, ne permite să identificăm spațiile E_2 și E_2^\perp .

Ortogonalul subspațiului E_6^\perp

$$E_6^\perp = \left\{ x \in E_6 \mid \langle x, y \rangle = 0 \text{ oricare ar fi } y \in E_6^\perp \right\}$$

este de asemenea un subspațiu D_4 -invariant al lui E_6 . Utilizând tabela de caractere [Koe] a grupului D_4

	1 e	2 a	a ²	2 b	2 ba
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	-1	1	1	-1
Γ_4	1	-1	1	-1	1
Γ_5	2	0	-2	0	0

se deduce că descompunerea reprezentării lui D_4 în E_6^\perp conține două reprezentări ireductibile de dimensiune 2. Folosind metoda usuală [Ser, Naj] de descompunere a unei reprezentări a unui grup finit în reprezentări ireductibile se obține că E_6 este suma ortogonală a trei subspații bidimensionale D_4 -invariante

$$E_6 = E_6^\perp \oplus E_{6,1}^\perp \oplus E_{6,2}^\perp$$

corespunzătoare proiectoarelor

$$\pi^\perp = \Theta \left(\frac{1}{7}, \frac{\sqrt{2}}{7}, \frac{1}{7}, \frac{3}{7}, \frac{2\sqrt{2}}{7}, \frac{1}{7} \right)$$

$$\pi_1^\perp = \Theta \left(\frac{4}{5}, -\frac{\sqrt{2}}{5}, 0, \frac{1}{10}, 0, \frac{1}{10} \right)$$

$$\pi_2^\perp = \Theta \left(\frac{2}{35}, \frac{2\sqrt{2}}{35}, -\frac{1}{7}, \frac{33}{70}, -\frac{2\sqrt{2}}{7}, \frac{17}{70} \right)$$

unde

$$\Theta(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & \alpha_2 & \alpha_3 & -\alpha_5 & -\alpha_6 \\ 0 & \alpha_1 & \alpha_3 & \alpha_3 & \alpha_2 & \alpha_5 \\ \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & 0 & -\alpha_6 \\ \alpha_3 & \alpha_2 & \alpha_5 & \alpha_4 & \alpha_6 & 0 \\ -\alpha_3 & \alpha_2 & 0 & \alpha_6 & \alpha_4 & \alpha_5 \\ -\alpha_2 & \alpha_3 & -\alpha_6 & 0 & \alpha_5 & \alpha_4 \end{pmatrix}$$

Fig. 15. D_4 -sistemul de puncte $D_4\{(1,0),(\sqrt{2},1)\}$.

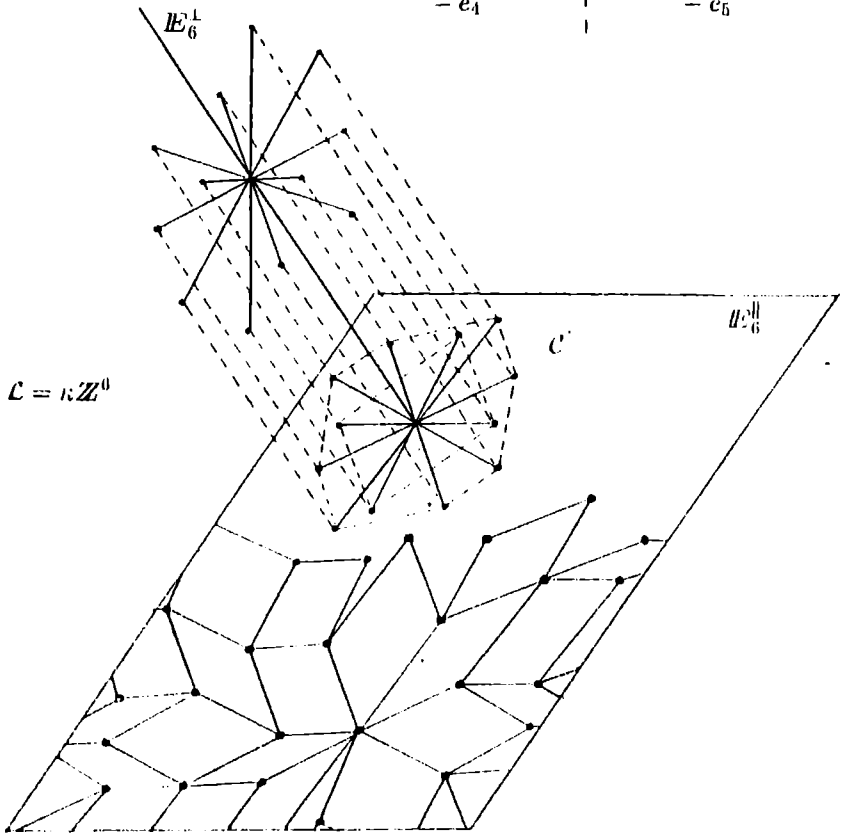
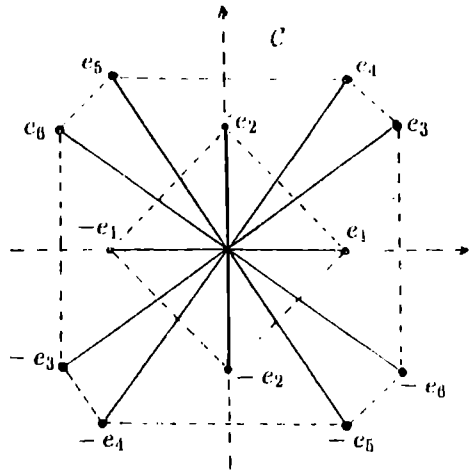


Fig. 16. Descompunerea $E_6 = E_6^{\parallel} \oplus E_6^{\perp}$ definită de D_4 sistemul de puncte $D_4\{(1,0),(\sqrt{2},1)\}$

\mathbb{Z} -modulul $\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^6$, unde $\kappa = 1/\varrho = \sqrt{7}$, este D_4 -invariant și

$$\pi^{\parallel}(\kappa \varepsilon_j) = e_j$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, 6\}$. Schema de proiecție $(\mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}, \mathcal{L})$ ne permite să definim pentru fiecare mulțime mărginită de interior nevid $\Omega \subset \mathbb{E}_6^{\perp}$ mulțimea model

$$\left\{ \pi^{\parallel} x \mid x \in \mathcal{L}, \pi^{\perp} x \in \Omega \right\}$$

unde $\pi^{\perp} = \pi_1^{\perp} + \pi_2^{\perp}$. Ea este reprezentată schematic în Fig. 16.

Elementele matricei

$$\lambda \pi^{\parallel} + \lambda_1 \pi_1^{\perp} + \lambda_2 \pi_2^{\perp}$$

sunt întregi dacă și numai dacă numerele

$$\begin{aligned} & \frac{1}{7}\lambda + \frac{4}{5}\lambda_1 + \frac{2}{35}\lambda_2 \\ & \frac{\sqrt{2}}{7}\lambda - \frac{\sqrt{2}}{5}\lambda_1 + \frac{2\sqrt{2}}{35}\lambda_2 \\ & \frac{1}{7}\lambda - \frac{1}{7}\lambda_2 \\ & \frac{3}{7}\lambda + \frac{1}{10}\lambda_1 + \frac{33}{70}\lambda_2 \\ & \frac{2\sqrt{2}}{7}\lambda - \frac{2\sqrt{2}}{7}\lambda_2 \\ & \frac{1}{7}\lambda + \frac{1}{10}\lambda_1 + \frac{17}{70}\lambda_2 \end{aligned}$$

sunt întregi. Deoarece $\frac{1}{7}\lambda - \frac{1}{7}\lambda_2$ și $\frac{2\sqrt{2}}{7}\lambda - \frac{2\sqrt{2}}{7}\lambda_2$ sunt simultan întregi dacă și numai dacă $\lambda = \lambda_2$, nu există $\lambda \in \mathbb{R}$, $|\lambda| > 1$ și $\lambda_1, \lambda_2 \in [-1, 1]$ astfel încât elementele matricei $\lambda \pi^{\parallel} + \lambda_1 \pi_1^{\perp} + \lambda_2 \pi_2^{\perp}$ să fie întregi. Prin urmare, metoda prezentată în paragrafele anterioare nu permite determinarea de autosimilarități, oricare ar fi fereastra de selecție utilizată. Problema dacă există sau nu în acest caz autosimilarități netriviale este o problemă deschisă.

7.6 Alte cuasicristale definite de G -sisteme de puncte

Multe modele bidimensionale bine-cunoscute [Ba6, Ple1] pot fi reobținute prin metoda prezentată plecând de la G -sisteme de puncte convenabil alese. Unele dintre autosimilaritățile lor pot de asemenea fi determinate cu ușurință.

Relația

$$a(x, y) = (x \cos(2\pi/m) - y \sin(2\pi/m), x \sin(2\pi/m) + y \cos(2\pi/m))$$

definește reprezentarea bidimensională uzuală a grupului ciclic

$$m \equiv C_m = \langle a \mid a^m \rangle.$$

O consecință a egalității de sisteme de puncte

$$C_5\{(1, 0), (-1, 0)\} = D_5\{(1, 0), (-1, 0)\} = C_{10}(1, 0) = D_{10}(1, 0)$$

este egalitatea de cuasicristale

$$C_5[(1, 0)] = D_5[(1, 0)] = C_{10}[(1, 0)] = D_{10}[(1, 0)].$$

Într-un mod similar se arată că au loc egalitățile de cuasicristale

$$C_8[(1, 0)] = D_8[(1, 0)] = C_4 \left[(1, 0), \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right]$$

$$= D_4 \left[(1, 0), \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right]$$

$$C_{12}[(1, 0)] = D_{12}[(1, 0)] = D_4 \left[(1, 0), \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$= C_4 \left[(1, 0), \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right].$$

Metoda de obținere a modelelor de cristale periodice și cuasicristale prezentată arată că există o legătură profundă între cele două tipuri de cristale. De exemplu,

$$C_3[(1, 0), (\alpha, 0)] \text{ este un } \begin{cases} C_3 - \text{cristal} & \text{daca } \alpha \in \mathbb{Q} \\ C_3 - \text{cuasicristal} & \text{daca } \alpha \notin \mathbb{Q}. \end{cases}$$

Capitolul 8

Cristale periodice definite de G -sisteme de puncte

8.1 Cristale definite de $D_6(1, 0)$

Considerăm reprezentarea bidimensională uzuală

$$a(x, y) = (x/2 - y\sqrt{3}/2, x\sqrt{3}/2 + y/2)$$

$$b(x, y) = (x, -y).$$

a grupului diedral

$$D_6 = \langle a, b \mid a^6, b^2, (ab)^2 \rangle.$$

și D_6 -sistemul de puncte generat de mulțimea $S = \{(1, 0)\}$ (Fig. 17)

$$C = D_6\{(1, 0)\} = \{e_1, e_2, e_3, -e_1, -e_2, -e_3\}$$

unde $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (1/2, \sqrt{3}/2)$, $e_3 = (-1/2, \sqrt{3}/2)$.

Acțiunea generatorilor lui D_6 pe mulțimea C poate fi descrisă cu ajutorul transformărilor

$$a = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ e_2 & e_3 & -e_1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ e_1 & -e_3 & -e_2 \end{pmatrix}.$$

Relațiile corespunzătoare

$$a = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 \\ \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & -\varepsilon_1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 \\ \varepsilon_1 & -\varepsilon_3 & -\varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

unde $\varepsilon_1 = (1, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0)$, $\varepsilon_3 = (0, 0, 1)$, definesc reprezentarea ortogonală

$$a(x_1, x_2, x_3) = (-x_3, x_1, x_2) \quad b(x_1, x_2, x_3) = (x_1, -x_3, -x_2)$$

a lui D_6 în \mathbb{E}_3 .

Fig. 17. D_6 -sistemul de puncte $D_6(1,0)$.

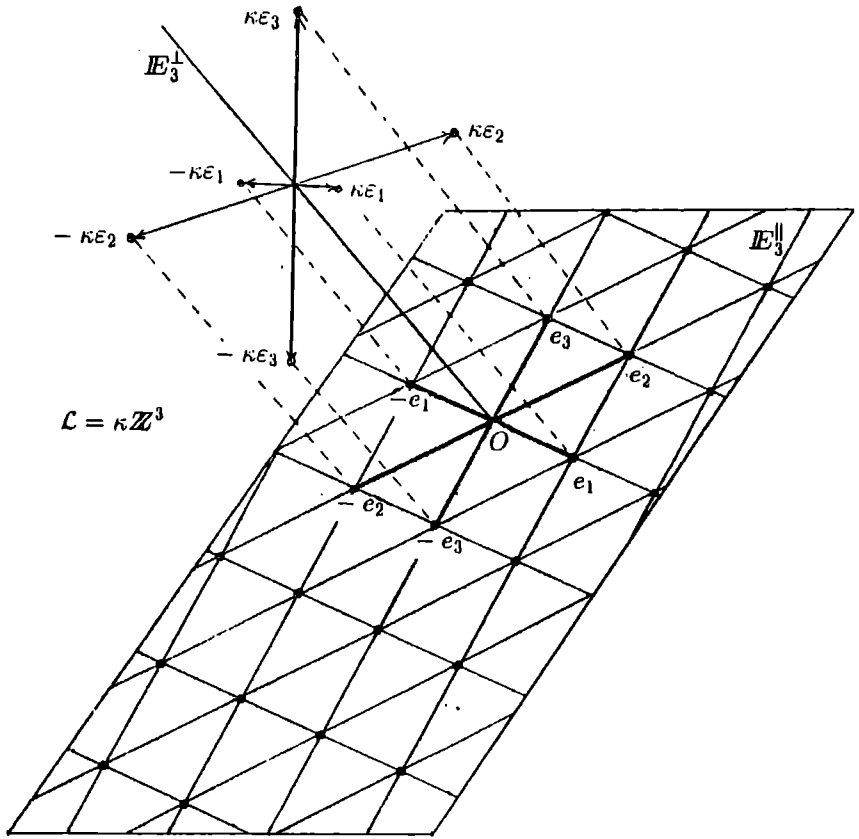
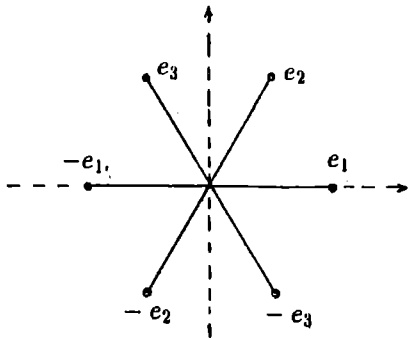


Fig. 18. Descompunerea $\mathbb{E}_3 = \mathbb{E}_3^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_3^{\perp}$ definită de D_6 -sistemul de puncte $D_6(1,0)$ și proiecția lui \mathcal{L} pe \mathbb{E}_3^{\parallel} .

Subspațiul

$$\mathbb{E}_3^{\parallel} = \{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \langle r, e_3 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_2 \}$$

este D_6 -invariant. Alegând $u_1 = (1, 0)$, $u_2 = (0, 1)$, se obține pentru \mathbb{E}_3^{\parallel} baza ortogonală

$$w_1 = (1, 1/2, -1/2) \quad w_2 = (0, \sqrt{3}/2, \sqrt{3}/2)$$

cu proprietatea $\|w_1\| = \|w_2\| = \sqrt{6}/2$. În acest caz $\varrho = 2/\sqrt{6}$, $\kappa = \sqrt{6}/2$ și utilizăm \mathbf{Z} -modulul G -invariant $\mathcal{L} = \kappa \mathbf{Z}^3$.

Vectorii $v_1 = (2/\sqrt{6}, 1/\sqrt{6}, -1/\sqrt{6})$ și $v_2 = (0, 1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ formează o bază ortonormată a lui \mathbb{E}_3^{\parallel} și izometria

$$\Xi: \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_3^{\parallel}: r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \varrho \langle r, e_3 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale grupului D_6 astfel încât $\Xi(1, 0) = v_1$, $\Xi(0, 1) = v_2$, ne permite să identificăm cele două spații.

Proectorii corespunzători subspațiului \mathbb{E}_3^{\parallel} și ortogonalului său \mathbb{E}_3^{\perp} sunt

$$\pi^{\parallel} = \Theta(2/3, 1/3) \quad \pi^{\perp} = \Theta(1/3, -1/3)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & -\beta \\ \beta & \alpha & \beta \\ -\beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

În acest caz $(\mathbb{E}_3^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_3^{\perp}, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece $\pi^{\perp} x = 0$ oricare ar fi $x \in \mathcal{L}$ astfel încât $x_1 = x_2$ și $x_3 = 0$.

Oricare ar fi $x \in \mathcal{L}$, avem

$$\pi^{\parallel} (\{x + \kappa e_1, x + \kappa e_2, x + \kappa e_3, x - \kappa e_1, x - \kappa e_2, x - \kappa e_3\}) = \pi^{\parallel} x + \mathcal{C}$$

și

$$\pi^{\parallel} (\kappa \mathbf{Z}^3) = \mathbf{Z} e_1 + \mathbf{Z} e_2 + \mathbf{Z} e_3 = \mathbf{Z} e_1 + \mathbf{Z} e_2$$

este o rețea în $\mathbb{E}_2 \cong \mathbb{E}_3^{\parallel}$.

Oricare ar fi mulțimea mărginită $\Omega \subset \mathbb{E}_3^{\perp}$, prin metoda proiecției benzii se obține fie o submulțime periodică a rețelei $\pi^{\parallel} (\kappa \mathbf{Z}^3)$, fie mulțimea vidă (Fig. 18).

8.2 Cristale definite de $O_h(1, 1, 0)$

Pentru a explica teoretic anumite analogii între fazele cubice și icosaedrale de compoziție chimică apropiată observate experimental este avantajos să utilizăm descrieri matematice asemănătoare. O soluție rezonabilă constă în utilizarea pentru descrierea fazei cubice a unui model matematic obținut prin metoda proiecției benzii în locul descrierii clasice.

Utilizând reprezentarea uzuală în \mathbb{E}_3

$$a(x, y, z) = (y, -x, z) \quad b(x, y, z) = (y, -z, -x)$$

a grupului complet al octaedrului

$$O_h \equiv m\bar{3}m = \langle a, b \mid a^4, b^6, (ab)^2 \rangle$$

considerăm O_h -sistemul de puncte

$$\mathcal{C} = O_h(1, 1, 0) = \{e_1, e_2, \dots, e_6, -e_1, -e_2, \dots, -e_6\}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (0, 1, 1) & e_4 &= (0, 1, -1) \\ e_2 &= (1, 0, 1) & e_5 &= (1, 0, -1) \\ e_3 &= (1, 1, 0) & e_6 &= (1, -1, 0). \end{aligned}$$

Plecând de la acțiunea generatorilor lui O_h pe \mathcal{C}

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ e_2 & -e_4 & e_6 & e_5 & -e_1 & -e_3 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ -e_3 & -e_1 & -e_2 & e_6 & e_4 & e_5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

obținem reprezentarea ortogonală

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (-x_5, x_1, -x_6, -x_2, x_4, x_3) \\ b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (-x_2, -x_3, -x_1, x_5, x_6, x_4). \end{aligned}$$

a lui O_h în \mathbb{E}_6 . Vectorii

$$w_1 = (0, 1, 1, 0, 1, 1) \quad w_2 = (1, 0, 1, 1, 0, -1) \quad w_3 = (1, 1, 0, -1, -1, 0)$$

formează o bază ortogonală a subspațiului O_h -invariant

$$\mathbb{E}_6^{\parallel} = \{(\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_6 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_3\}$$

și

$$\|w_1\| = \|w_2\| = \|w_3\|.$$

Baza ortonormată corespunzătoare

$$v_1 = \varrho w_1 \quad v_2 = \varrho w_2 \quad v_3 = \varrho w_3$$

unde $\varrho = 1/\|w_1\| = 1/2$, ne permite să definim izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel} : r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_6 \rangle)$$

adică

$$\Xi(x, y, z) = ((y+z)/2, (x+z)/2, (x+y)/2, (y-z)/2, (x-z)/2, (x-y)/2)$$

și să identificăm spațiile \mathbb{E}_3 și \mathbb{E}_6^{\parallel} .

Proiectorii corespunzători descompunerii $\mathbb{E}_6 = \mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}$ sunt

$$\pi^{\parallel} = \Theta(1/2, 1/4) \quad \pi^{\perp} = \Theta(1/2, -1/4)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta & 0 & -\beta & -\beta \\ \beta & \alpha & \beta & -\beta & 0 & \beta \\ \beta & \beta & \alpha & \beta & \beta & 0 \\ 0 & -\beta & \beta & \alpha & \beta & -\beta \\ -\beta & 0 & \beta & \beta & \alpha & \beta \\ -\beta & \beta & 0 & -\beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Fie $\kappa = 1/\varrho = 2$ și fie $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$, ..., $\varepsilon_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$ baza canonică a lui \mathbb{E}_6 . Deoarece, având în vedere identificarea $\Xi: \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel}$, avem

$$\pi^{\parallel}(\kappa\varepsilon_j) = e_j$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, 6\}$, proiecția \mathbf{Z} -modulului $\mathcal{L} = \kappa\mathbf{Z}^6 = 2\mathbf{Z}^6$ pe \mathbb{E}_6^{\parallel} este rețeaua $L = \sum_{j=1}^6 \mathbf{Z}e_j = \mathbf{Z}e_1 + \mathbf{Z}e_2 + \mathbf{Z}e_3$. Metoda proiecției benzii ne permite să definim modele de cristale periodice cubice utilizând anumite ferestre de selecție.

8.3 Cristale definite de $O_h\{(1, 0, 0), (\zeta, 0, 0)\}$

În această secțiune vom prezenta o clasă de modele depinzând de un parametru obținute prin metoda proiecției benzii care arată legătura profundă existentă între cristalele periodice și cuasicristale.

Fie $\zeta \in (0, \infty)$, $\zeta \neq 1$, și fie O_h -sistemul de puncte

$$C = O_h\{(1, 0, 0), (\zeta, 0, 0)\} = \{e_1, e_2, \dots, e_6, -e_1, -e_2, \dots, -e_6\}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (1, 0, 0) & e_4 &= (\zeta, 0, 0) \\ e_2 &= (0, 1, 0) & e_5 &= (0, \zeta, 0) \\ e_3 &= (0, 0, 1) & e_6 &= (0, 0, \zeta). \end{aligned}$$

Plecând de la acțiunea generatorilor lui $O_h \cong m\bar{3}m$ pe C

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ -e_2 & e_1 & e_3 & -e_5 & e_4 & e_6 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 & e_6 \\ -e_3 & -e_1 & -e_2 & -e_6 & -e_4 & -e_5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

se obține reprezentarea ortogonală

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (x_2, -x_1, x_3, x_5, -x_4, x_6) \\ b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) &= (-x_2, -x_3, -x_1, -x_5, -x_6, -x_4) \end{aligned}$$

a lui O_h în \mathbb{E}_6 . Vectorii

$$w_1 = (1, 0, 0, \zeta, 0, 0) \quad w_2 = (0, 1, 0, 0, \zeta, 0) \quad w_3 = (0, 0, 1, 0, 0, \zeta)$$

formează o bază ortogonală a subspațiului O_h -invariant

$$\mathbb{E}_6^{\parallel} = \{(\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \dots, \langle r, e_6 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_3\}$$

și

$$\|w_1\| = \|w_2\| = \|w_3\|.$$

Baza ortonormată corespunzătoare

$$v_1 = \varrho w_1 \quad v_2 = \varrho w_2 \quad v_3 = \varrho w_3$$

unde $\varrho = 1/\|w_1\| = 1/\sqrt{1+\zeta^2}$, ne permite să definim izometria

$$\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel} : r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_6 \rangle)$$

și să identificăm spațiile \mathbb{E}_3 și \mathbb{E}_6^{\parallel} .Proectorii corespunzători descompunerii $\mathbb{E}_6 = \mathbb{E}_6^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_6^{\perp}$ sunt

$$\pi^{\parallel} = \Theta \left(\frac{1}{1+\zeta^2}, \frac{\zeta}{1+\zeta^2}, \frac{\zeta^2}{1+\zeta^2} \right) \quad \pi^{\perp} = \Theta \left(\frac{\zeta^2}{1+\zeta^2}, \frac{-\zeta}{1+\zeta^2}, \frac{1}{1+\zeta^2} \right)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & \beta \\ \beta & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}.$$

În acest caz $\kappa = 1/\varrho = \sqrt{1+\zeta^2}$ și având în vedere identificarea $\Xi : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_6^{\parallel}$, obținem

$$\pi^{\parallel}(\kappa e_j) = e_j$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, \dots, 6\}$. Prin urmare, proiecția \mathbb{Z} -modulului

$$\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^6 = \sqrt{1+\zeta^2} \mathbb{Z}^6$$

pe \mathbb{E}_6^{\parallel} este \mathbb{Z} -modulul $L = \sum_{j=1}^6 \mathbb{Z} e_j$. Deoarece

$$L = \sum_{j=1}^6 \mathbb{Z} e_j \text{ este un } \mathbb{Z} \text{-modul} \begin{cases} \text{discret în } \mathbb{E}_3 & \text{daca } \zeta \in \mathbb{Q} \\ \text{dens în } \mathbb{E}_3 & \text{daca } \zeta \notin \mathbb{Q} \end{cases}$$

metoda proiecției benzii ne permite să definim, pentru fiecare fereastră de selecție fie un model de cristal periodic, fie de cusicristal în funcție de apartenența lui ζ la mulțimea numerelor raționale \mathbb{Q} .

8.4 Un cristal definit de $T_d(-1/2, 1/2, 1/2)$

Unele modele de cristal periodic obținute prin metoda proiecției benzii pot oferi importante facilități matematice în descrierea proprietăților fizice ale cristalului, putând fi utilizate ca descrieri complementare descrierii clasice. În acest paragraf vom construi un astfel de model util în descrierea proprietăților cristalelor cu structura diamantului și în general a cristalelor cu doi atomi în celula elementară. Detalii privind acest model matematic în fizica cristalelor vor fi prezentate în capitolele 11 și 12. Considerăm reprezentarea uzuală

$$a(x, y, z) = (-y, x, -z) \quad b(x, y, z) = (x, -z, -y)$$

a grupului complet al tetraedrului

$$T_d = \bar{4}3m = \langle a, b \mid a^4 = b^2 = (ab)^3 = e \rangle$$

și T_d -sistemul de puncte generat de mulțimea $S = \{(-1/2, 1/2, 1/2)\}$ (Fig. 19)

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= T_d(-1/2, 1/2, 1/2) \cup T_d(1/2, -1/2, -1/2) \\ &= \{e_1, e_2, e_3, e_4, -e_1, -e_2, -e_3, -e_4\} \end{aligned}$$

unde

$$\begin{aligned} e_1 &= (-1/2, 1/2, 1/2) & e_2 &= (1/2, -1/2, 1/2) \\ e_3 &= (1/2, 1/2, -1/2) & e_4 &= (-1/2, -1/2, -1/2). \end{aligned}$$

Acțiunea generatorilor lui T_d pe \mathcal{C} poate fi descrisă prin relațiile

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\ e_4 & e_3 & e_1 & e_2 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\ e_4 & e_2 & e_3 & e_1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Transformările corespunzătoare $a, b : \mathbb{E}_4 \longrightarrow \mathbb{E}_4$

$$\begin{aligned} a &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 \\ \varepsilon_4 & \varepsilon_3 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 \end{pmatrix} \\ b &= \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_4 \\ \varepsilon_4 & \varepsilon_2 & \varepsilon_3 & \varepsilon_1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

unde $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, 0)$, $\varepsilon_3 = (0, 0, 1, 0)$, $\varepsilon_4 = (0, 0, 0, 1)$ este baza canonică a lui \mathbb{E}_4 , definesc reprezentarea ortogonală a lui T_d în \mathbb{E}_4

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2, x_3, x_4) &= (x_3, x_4, x_2, x_1) \\ b(x_1, x_2, x_3, x_4) &= (x_4, x_2, x_3, x_1). \end{aligned}$$

Subspațiul

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_4^{\parallel} &= \{(\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \langle r, e_3 \rangle, \langle r, e_4 \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_3\} \\ &= \{x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0\} \end{aligned}$$

generat de vectorii ortogonali

$$\begin{aligned} w_1 &= (-1/2, 1/2, 1/2, -1/2) \\ w_2 &= (1/2, -1/2, 1/2, -1/2) \\ w_3 &= (1/2, 1/2, -1/2, -1/2) \end{aligned}$$

și ortogonalul lui

$$\mathbb{E}_4^\perp = \{ x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \mid x_1 = x_2 = x_3 = x_4 \}$$

sunt subspații T_d -invariante. În acest caz $\|w_1\| = \|w_2\| = \|w_3\| = 1$, $\varrho = 1$, vectorii $v_1 = w_1$, $v_2 = w_2$, $v_3 = w_3$, formează o bază ortonormată a subspațiului \mathbb{E}_4^\parallel , și izometria

$$\Xi: \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_4^\parallel: r \mapsto (\langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \langle r, e_3 \rangle, \langle r, e_4 \rangle)$$

care este un izomorfism de reprezentări ale grupului T_d astfel încât

$$\Xi(1, 0, 0) = v_1 \quad \Xi(0, 1, 0) = v_2 \quad \Xi(0, 0, 1) = v_3$$

ne permite să identificăm spațiul "fizic" \mathbb{E}_3 cu \mathbb{E}_4^\parallel .

Proectorii ortogonali corespunzători descompunerii $\mathbb{E}_4^\parallel \oplus \mathbb{E}_4^\perp$ sunt

$$\pi^\parallel = \Theta(3/4, -1/4) \quad \pi^\perp = \Theta(1/4, 1/4)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \beta & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & \beta \\ \beta & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \beta & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Urmând algoritmul general obținem $\kappa = 1/\varrho = 1$, $\mathcal{L} = \mathbb{Z}^4$, iar ținând seama de identificarea spațiilor \mathbb{E}_3 și \mathbb{E}_4^\parallel

$$\pi^\parallel(\varepsilon_j) = e_j \quad \blacktriangleright$$

oricare ar fi $j \in \{1, 2, 3, 4\}$. Perechea $(\mathbb{E}_4^\parallel \oplus \mathbb{E}_4^\perp, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece restricția lui π^\parallel la \mathcal{L} nu este injectivă. Într-adevăr, $\pi^\parallel x = 0$ oricare ar fi $x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathcal{L}$ astfel încât $x_1 = x_2 = x_3 = x_4$.

Deoarece $e_1 + e_2 + e_3 + e_4 = 0$, proiecția

$$\pi^\parallel(\mathcal{L}) = \sum_{j=1}^4 \mathbb{Z}e_j = \sum_{j=1}^3 \mathbb{Z}e_j,$$

a lui \mathcal{L} pe \mathbb{E}_4^\parallel este o rețea. Oricare ar fi mulțimea marginită $\Omega \subset \mathbb{E}_4^\parallel$ astfel încât $\Omega \cap \pi^\perp(\mathcal{L}) \neq \emptyset$, mulțimea

$$\{ \pi^\parallel x \mid x \in \mathcal{L}, \pi^\perp x \in \Omega \}$$

este o submulțime periodică (Fig 20) a rețelei $\sum_{j=1}^3 \mathbb{Z}e_j$.

Fig. 19. T_d -sistemul de puncte
 $T_d(-1/2, 1/2, 1/2)$.

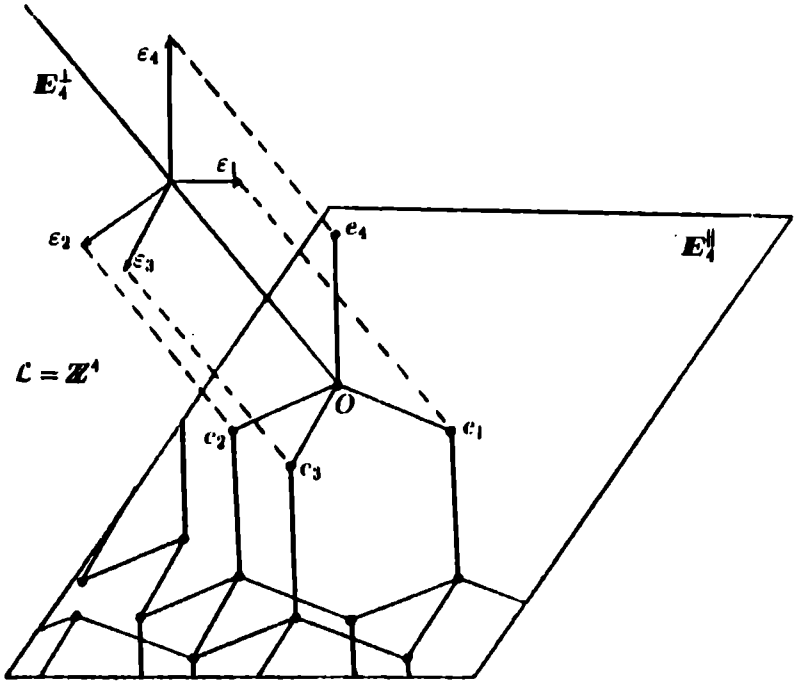
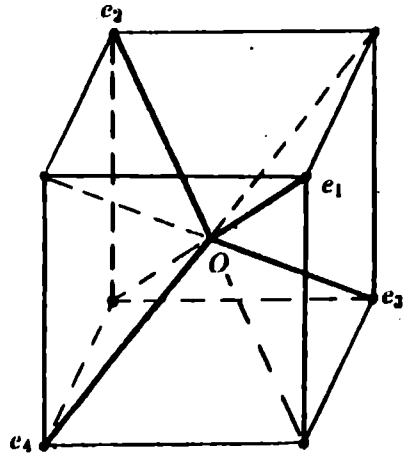


Fig. 20. Structura diamantului obținută prin metoda proiecției benzii

În particular, pentru

$$\Omega = \{(\alpha, \alpha, \alpha, \alpha) \mid -1/4 < \alpha \leq 1/4\}$$

avem

$$\{\pi^{\parallel}x \mid x \in \mathcal{L}, \pi^{\perp}x \in \Omega\} = \pi^{\parallel}\mathbf{M}$$

unde

$$(8.1) \quad \mathbf{M} = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbf{Z}^4 \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \in \{0; 1\}\}.$$

Orice punct aparținând mulțimii $\mathbf{M}^{\parallel} = \pi^{\parallel}\mathbf{M}$, are în \mathbf{M}^{\parallel} patru vecini cei mai apropiați și aceștia reprezintă vârfurile unui tetraedru regulat având ca centru punctul considerat. Spunem că mulțimea \mathbf{M}^{\parallel} are structura diamantului. Deoarece

$$\pi^{\parallel} : \mathbf{M} \longrightarrow \mathbf{M}^{\parallel}$$

este o bijecție, mulțimea \mathbf{M} poate deasemenea să fie utilizată ca un model matematic pentru cristalele cu structura diamantului.

Capitolul 9

Șiruri convergente de cristale periodice și cuasicristale

În cazul mai multor cuasicristale reale s-a descoperit existența unor cristale periodice cu compoziție chimică apropiată și cu imagini de difracție apropiate de cele ale cuasicristalului. În general parametrii celulei elementare a acestor cristale, numite *cristale aproximante*, sunt relativ mari, iar ordinea locală este apropiată de ordinea locală existentă în cuasicristal, ceea ce le face utile în elaborarea unor modele structurale.

Din punct de vedere matematic, în cazul modelelor obținute prin metoda proiecției benzii, trecerea de la cuasicristal la un cristal aproximant se realizează prin rotația benzii utilizate. În cazul modelelor obținute plecând de la G -sisteme de puncte există posibilitatea unei abordări mai profunde a acestei treceri bazată pe deformarea G -sistemului de puncte utilizat. Ea va fi prezentată în cadrul acestui capitol.

9.1 Limita unui șir convergent

Un șir de cuasicristale (resp. de cristale periodice)

$$(G\{e_{1j}, \dots, e_{mj}\})_{j=1}^{\infty}$$

se numește *convergent* dacă șirul corespunzător de G -sisteme de puncte

$$(G\{e_{1j}, \dots, e_{mj}\})_{j=1}^{\infty}$$

este convergent, adică, dacă fiecare șir $(e_{ij})_{j=1}^{\infty}$ este convergent în \mathbb{R}^n . Exemple de șiruri convergente de G -sisteme de puncte au fost prezentate în paragraful 4.4

Dacă $(G[e_{1j}, \dots, e_{mj}])_{j=1}^{\infty}$ este un șir convergent, atunci cuasicristalul (resp. cristalul periodic)

$$G[\lim_{j \rightarrow \infty} e_{1j}, \lim_{j \rightarrow \infty} e_{2j}, \dots, \lim_{j \rightarrow \infty} e_{mj}]$$

este numit *limita* șirului considerat.

9.2 Câteva șiruri convergente

Egalitatea de sisteme de puncte

$$D_4\{(1, 0), (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})\} = D_8(1, 0)$$

arată că oricare ar fi șirul de numere reale $(\zeta_j)_{j=1}^{\infty}$ astfel încât

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \zeta_j = 1/\sqrt{2}$$

avem

$$\lim_{j \rightarrow \infty} D_4\{(1, 0), (\zeta_j, \zeta_j)\} = D_8(1, 0).$$

Oricare ar fi $j \in \{1, 2, 3, \dots\}$, plecând de la D_4 -sistemul de puncte

$$D_4\{(1, 0), (\zeta_j, \zeta_j)\} = \{e_1(j), e_2(j), e_3(j), e_4(j), -e_1(j), -e_2(j), -e_3(j), -e_4(j))\}$$

unde

$$e_1(j) = (1, 0) \quad e_2(j) = (\zeta_j, \zeta_j) \quad e_3(j) = (0, 1) \quad e_4(j) = (-\zeta_j, \zeta_j)$$

și de la acțiunea generatorilor lui D_4 pe \mathcal{C}

$$a = \begin{pmatrix} e_1(j) & e_2(j) & e_3(j) & e_4(j) \\ e_3(j) & e_4(j) & -e_1(j) & -e_2(j) \end{pmatrix}$$

$$b = \begin{pmatrix} e_1(j) & e_2(j) & e_3(j) & e_4(j) \\ e_1(j) & -e_4(j) & -e_3(j) & -e_2(j) \end{pmatrix}$$

se obține reprezentarea ortogonală

$$\begin{aligned} a(x_1, x_2, x_3, x_4) &= (-x_3, -x_4, x_1, x_2) \\ b(x_1, x_2, x_3, x_4) &= (x_1, -x_4, -x_3, -x_2) \end{aligned}$$

a lui D_4 în \mathbb{E}_4 .

Subspațiul D_4 -invariant corespunzător

$$\mathbb{E}_{4,j}^{\parallel} = \{(\langle r, e_1(j) \rangle, \langle r, e_2(j) \rangle, \langle r, e_3(j) \rangle, \langle r, e_4(j) \rangle) \mid r \in \mathbb{E}_2\}$$

admite baza ortogonală

$$e^1(j) = (1, \zeta_j, 0, -\zeta_j) \quad e^2(j) = (0, \zeta_j, 1, \zeta_j).$$

Baza ortonormată corespunzătoare este

$$v_1(j) = \varrho_j e^1(j) \quad v_2(j) = \varrho_j e^2(j)$$

unde $\varrho_j = 1/\|e^1(j)\| = 1/\sqrt{1+2\zeta_j^2}$. Izometria

$$\Xi_j : \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_4^{\parallel} :$$

$$r \mapsto (\varrho_j \langle r, e_1(j) \rangle, \varrho_j \langle r, e_2(j) \rangle, \varrho_j \langle r, e_3(j) \rangle, \varrho_j \langle r, e_4(j) \rangle)$$

are proprietatea că $\Xi_j(1, 0) = v_1(j)$, $\Xi_j(0, 1) = v_2(j)$, și ea ne permite să identificăm spațiile \mathbb{E}_2 și $\mathbb{E}_{4,j}^{\parallel}$.

Proietorii corespunzători descompunerii ortogonale $\mathbb{E}_4 = \mathbb{E}_{4,j}^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_{4,j}^{\perp}$ sunt

$$\pi_j^{\parallel} = \Theta \left(\frac{1}{1+2\zeta_j^2}, \frac{\zeta_j}{1+2\zeta_j^2}, \frac{2\zeta_j^2}{1+2\zeta_j^2} \right) \quad \pi_j^{\perp} = \Theta \left(\frac{2\zeta_j^2}{1+2\zeta_j^2}, \frac{-\zeta_j}{1+2\zeta_j^2}, \frac{1}{1+2\zeta_j^2} \right)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & -\beta \\ \beta & \gamma & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \gamma \end{pmatrix}.$$

Deoarece punând $\kappa_j = 1/\varrho_j$, $\varepsilon_1 = (1, 0, 0, 0)$, $\varepsilon_2 = (0, 1, 0, 0)$, $\varepsilon_3 = (0, 0, 1, 0)$, $\varepsilon_4 = (0, 0, 0, 1)$, avem

$$\pi_j^{\parallel}(\kappa_j \varepsilon_m) = e_m(j)$$

oricare ar fi $m \in \{1, 2, 3, 4\}$, proiecția \mathbf{Z} -modulului

$$\mathcal{L}_j := \kappa_j \mathbf{Z}^4$$

este \mathbf{Z} -modulul $L_j = \sum_{m=1}^4 \mathbf{Z} e_m(j)$.

Se poate ușor vedea că limitele obiectelor matematice considerate sunt obiectele similare obținute în cazul lui $D_8(1, 0)$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} e^1(j) = e^1 \quad \lim_{j \rightarrow \infty} e^2(j) = e^2$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} v_1(j) = v_1 \quad \lim_{j \rightarrow \infty} v_2(j) = v_2$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \pi_j^{\parallel} = \pi^{\parallel} \quad \lim_{j \rightarrow \infty} \pi_j^{\perp} = \pi^{\perp}$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \mathcal{L}_j = \mathcal{L} \quad \lim_{j \rightarrow \infty} L_j = L.$$

Fie

$$\Omega_j = \pi_j^{\perp}((-\kappa/2, \kappa/2)^4) \quad \Omega = \pi^{\perp}((-\kappa/2, \kappa/2)^4).$$

Deoarece

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \Omega_j = \Omega$$

se poate considera că șirul de mulțimi

$$(9.1) \quad \left\{ \pi_j^{\parallel} x \mid x \in \mathcal{L}_j, \pi_j^{\perp} x \in \Omega_j \right\}$$

este convergent și limita sa este

$$(9.2) \quad \left\{ \pi^{\parallel} x \mid x \in \mathcal{L}, \pi^{\perp} x \in \Omega \right\}$$

adică,

$$(9.3) \quad \lim_{j \rightarrow \infty} D_4[(1, 0), (\zeta_j, \zeta_j)] = D_8[(1, 0)].$$

Trebuie să subliniem că deși parametrii care descriu modelul au o variație continuă deformarea modelului conține și anumite elemente de discontinuitate: alături de o variație continuă a pozițiilor punctelor modelului se produc și salturi ale unor puncte (puncte care dispar și reapar concomitent la nică distanță). Rotația benzii face ca unele puncte ale rețelei utilizate să iasă din bandă iar altele să intre în bandă.

Dacă șirul $(\zeta_j)_{j=1}^{\infty}$ este ales astfel încât termenii lui să fie numere raționale atunci $(D_4[(1, 0), (\zeta_j, \zeta_j)])_{j=1}^{\infty}$ este un șir de cristale periodice convergent la cuasicristalul $D_8[(1, 0)]$. Dacă el este ales astfel încât termenii lui să fie numere iraționale atunci $(D_4[(1, 0), (\zeta_j, \zeta_j)])_{j=1}^{\infty}$ este un șir de cuasicristale convergent la cuasicristalul $D_8[(1, 0)]$.

Relația dintre cristalele periodice și cuasicristale este foarte profundă [Ba3, Kra3]. De exemplu, utilizând faptul că pentru $\alpha, \beta \in (0, \infty)$

$$D_4[(\alpha, \beta)] \text{ este un } \begin{cases} \text{cristal periodic} & \text{daca } \alpha/\beta \in \mathbb{Q} \\ \text{cuasicristal} & \text{daca } \alpha/\beta \notin \mathbb{Q} \end{cases}$$

se poate ușor vedea că există șiruri convergente de cuasicristale care au ca limită cristale periodice.

Utilizând reprezentarea în \mathbb{E}_3 a grupului tetraedrului

$$T = 23 = \langle a, b \mid a^2, b^3, (ab)^3 \rangle$$

definită prin

$$a(x, y, z) = (-x, -y, z) \quad b(x, y, z) = (y, z, x)$$

obținem

$$\begin{aligned} \lim_{j \rightarrow \infty} T[(1, 0, \theta_j)] &= Y[(1, 0, \tau)] \\ \lim_{j \rightarrow \infty} T[a_j, b_j, c_j] &= Y[(2\tau, 0, 0)] \\ \lim_{j \rightarrow \infty} T[a'_j, b'_j, c'_j] &= Y[(1 + \tau, 1 + \tau, 1 + \tau)] \end{aligned}$$

unde

$$\begin{aligned} a_j &= (2\theta_j, 0, 0) \\ b_j &= (1, \theta_j, 1 + \theta_j) \\ c_j &= (-1, \theta_j, 1 + \theta_j) \\ a'_j &= (1 + \theta_j, 1 + \theta_j, 1 + \theta_j) \\ b'_j &= (-1 - \theta_j, 1 + \theta_j, 1 + \theta_j) \\ c'_j &= (0, \theta_j, 1 + 2\theta_j) \end{aligned}$$

9.3 Deformarea continuă a unui cristal periodic sau cuasicristal

Familia continuă de D_4 -cuasicristale

$$D_4 \left[(1, 0), \left((1-t)/\sqrt{2} + t\sqrt{3}/2, (1-t)/\sqrt{2} + t/2 \right) \right]$$

indexată cu ajutorul parametrului $t \in [0, 1]$, este o *deformare continuă* a lui $D_8[(1, 0)]$ în $D_{12}[(1, 0)]$.

Într- un mod similar, familia continuă

$$T[(1, 0, t)]$$

indexată cu ajutorul parametrului $t \in [1, \tau]$, poate fi privită ca o deformare continuă a cristalului periodic cubic $T[(1, 0, 1)]$ în cuasicristalul icosaedral $Y[(1, 0, \tau)]$.

Deoarece

$$T[(1, 0, t)] \text{ este un } \begin{cases} \text{cristal periodic} & \text{daca } t \in \mathbb{Q} \\ \text{cuasicristal} & \text{daca } t \notin \mathbb{Q} \end{cases}$$

familia considerată conține în același timp cristale periodice și cuasicristale.

Relația între fazele cristaline și cuasicristaline a făcut obiectul multor studii experimentale și teoretice [Dun4, Gra, Kat2, Kra2, Kra3]. Metoda de descriere a cristalelor periodice și a cuasicristalelor dezvoltată în această carte oferă largi facilități în studiul acestei relații.

Capitolul 10

Scheme de proiecție definite de G -sisteme de puncte

În capitolele anterioare am arătat că plecând de la un G -sistem de puncte

$$\mathcal{L} = \{e_1, \dots, e_k, -e_1, \dots, -e_k\}$$

definit utilizând o reprezentare ortogonală \mathbb{R} -ireductibilă a lui G în \mathbb{E}_n se poate obține o reprezentare ortogonală a lui G în \mathbb{E}_k , o descompunere a lui \mathbb{E}_k în sumă directă de subspații G -invariante ortogonale $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}$ astfel încât reprezentarea lui G în \mathbb{E}_k^{\parallel} să fie echivalentă cu reprezentarea lui G în \mathbb{E}_n și că există o rețea $\mathcal{L} \subset \mathbb{E}_k$ astfel încât identificând spațiile \mathbb{E}_n și \mathbb{E}_k^{\parallel} să avem

$$\pi^{\parallel}(\mathcal{L}) = \sum_{j=1}^k \mathbf{Z}e_j.$$

Am constatat de asemenea că, în general, $(\mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_k^{\perp}, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece, în general, restricția lui π^{\parallel} la \mathcal{L} nu este injectivă. În acest paragraf vom arăta că întotdeauna există un subspațiu $V_s \subset \mathbb{E}_k^{\perp}$ astfel încât, notând cu \mathcal{D} proiecția ortogonală a lui \mathcal{L} pe $\mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus V_s$, perechea $(\mathbb{E}_k^{\parallel} \oplus V_s, \mathcal{D})$ să fie o schemă de proiecție.

În virtutea teoremei (4.5.1) \mathbf{Z} -modulul $\mathcal{L}^{\perp} = \pi^{\perp}(\mathcal{L})$ se poate scrie ca suma directă

$$\mathcal{L}^{\perp} = \mathcal{L}_s^{\perp} \oplus \mathcal{L}_d^{\perp}$$

dintre o rețea \mathcal{L}_d^{\perp} de rang d și un \mathbf{Z} -modul \mathcal{L}_s^{\perp} dens într-un subspațiu $V_s \subset \mathbb{E}_k^{\perp}$ de dimensiune s , astfel încât $d + s = \dim \mathbb{E}_k^{\perp}$. Conform teoremei (4.5.2) V_s este un subspațiu G -invariant.

Fie

$$(10.1) \quad V_d = \{x \in \mathbb{E}_k^{\perp} \mid \langle x, y \rangle = 0 \text{ oricare ar fi } y \in V_s\}$$

ortogonalul lui V_s în \mathbb{E}_k^\perp . Deoarece reprezentarea lui G în \mathbb{E}_k^\perp este ortogonală și V_s este un subspațiu G -invariant rezultă că V_d este de asemenea un subspațiu G -invariant. Oricare ar fi $x \in \mathbb{E}_k$, există $x^\parallel \in \mathbb{E}_k^\parallel$, $x^s \in V_s$ și $x^d \in V_d$ unic determinați astfel încât $x = x^\parallel + x^s + x^d$. Aplicațiile

$$\begin{aligned}\pi^\parallel &: \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k : x \mapsto x^\parallel \\ \pi^s &: \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k : x \mapsto x^s \\ \pi^d &: \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k : x \mapsto x^d\end{aligned}$$

sunt proiectorii ortogonali corespunzători descompunerii $\mathbb{E}_k = \mathbb{E}_k^\parallel \oplus V_s \oplus V_d$.

Deoarece $\pi^d(\mathcal{L}) \subset V_d$ este un \mathbf{Z} -modul discret, conform teoremei (6.1.2) elementele matricei proiecteurului ortogonal corespunzător spațiului $E = \mathbb{E}_k^\parallel \oplus V_s$,

$$q : \mathbb{E}_k \longrightarrow \mathbb{E}_k \quad p = \pi^\parallel + \pi^s = 1 - \pi^d$$

în baza $\{\kappa_{\mathbb{E}_1}, \kappa_{\mathbb{E}_2}, \dots, \kappa_{\mathbb{E}_k}\}$ a lui \mathcal{L} sunt raționale. Prin urmare \mathbf{Z} -modulul

$$\mathcal{D} = q(\mathcal{L})$$

este o rețea în E . Aplicațiile

$$\begin{aligned}p^\parallel &: E \longrightarrow E : x \mapsto x^\parallel \\ p^\perp &: E \longrightarrow E : x \mapsto x^s\end{aligned}$$

sunt proiectorii ortogonali corespunzători descompunerii $E = \mathbb{E}_k^\parallel \oplus V_s$.

Teorema 10.0.1 *Colecția de spații și aplicații*

$$\mathbb{E}_k^\parallel \xleftarrow{p^\parallel} \mathbb{E}_k^\parallel \oplus V_s \xrightarrow{p^\perp} V_s$$

$$\cup$$

$$\mathcal{D}$$

este o schema de proiecție astfel încât

$$p^\parallel(\mathcal{D}) = \sum_{j=1}^k \mathbf{Z}e_j.$$

Demonstrație: Am arătat deja că \mathcal{D} este o rețea în E . În virtutea relației $p^\perp(\mathcal{D}) = \pi^s(p(\mathcal{L})) = \pi^s(\mathcal{L})$ și a definiției lui V_s , proiecția $p^\perp(\mathcal{D})$ este densă în V_s . Mai avem de arătat doar că restricția lui p^\parallel la \mathcal{D} este injectivă. Pentru aceasta este suficient să arătăm că $\text{Ker}(p^\parallel|_{\mathcal{D}}) = \{0\}$, ceea ce este echivalent cu a arăta că $\text{Ker}(\pi^\parallel|_{\mathcal{L}}) \subset V_d$. Avem de analizat cazul $\text{Ker}(\pi^\parallel|_{\mathcal{L}}) \neq \{0\}$. Fie $x \in \mathcal{L} - \{0\}$ astfel încât $\pi^\parallel x = 0$. Relația $\text{Ker} \pi^\parallel = \mathbb{E}_k^\perp$ arată că $x \in \mathcal{L} \cap \mathbb{E}_k^\perp$. Oricare ar fi $y \in \mathcal{L}$, punctele $(z_1, z_2, \dots, z_k) \in \mathbb{E}_k$ satisfacând ecuația

$$x_1(z_1 - y_1) + x_2(z_2 - y_2) + \dots + x_k(z_k - y_k) = 0$$

formează un hiperplan H_y perpendicular pe x care trece prin y . Hiperplanul H_y intersectează subspațiul unidimensional

$$\mathbb{R}x = \{\alpha x \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$$

în punctul corespunzător lui

$$\alpha = (x_1 y_1 + \dots + x_k y_k) / (x_1^2 + \dots + x_k^2) = \langle x, y \rangle / \|x\|^2.$$

Deoarece $\langle x, y \rangle \in \kappa^2 \mathbb{Z}$, distanța minimală între două hiperplane distincte ale familiei de hiperplane paralele $\{H_y \mid y \in \mathcal{L}\}$ este $\kappa^2 / \|x\|$. Reuniunea

$$H = \bigcup_{y \in \mathcal{L}} H_y$$

de hiperplane ortogonale lui $x \in \mathbb{E}_k^\perp$ conține \mathbb{Z} -modulul $\mathcal{L}^\perp = \pi^\perp(\mathcal{L})$.

Trebuie să avem $x \in V_d$ deoarece, în caz contrar, rețeaua \mathcal{L}^\perp nu poate fi densă în V_s . Într-adevăr, presupunând că $x \notin V_d$, rezultă că există $z \in V_s$ astfel încât $\langle x, z \rangle \neq 0$. În această situație, subspațiul unidimensional

$$\mathbb{R}z = \{\alpha z \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$$

al lui V_s nu este conținut în H . Intersecția $H \cap \mathbb{R}z$ este o mulțime discretă, și oricare ar fi $z' \in \mathbb{R}z - H$, distanța δ între z' și H este strict pozitivă, și deci bila deschisă de centru z' și rază δ nu conține nici un element al lui \mathcal{L}^\perp . Rămâne că $x \in V_d$.

Proiecția rețelei \mathcal{D} pe \mathbb{E}_k^\parallel coincide cu \mathbb{Z} -modulul generat de G -sistemul de puncte \mathcal{C}

$$\pi^\parallel(\mathcal{D}) = \pi^\parallel((\pi^\parallel + \pi^\perp)(\mathcal{L})) = \pi^\parallel(\mathcal{L}) = \sum_{j=1}^k \mathbb{Z}e_j.$$

□

10.1 Schema de proiecție definită de $D_{10}(1, 0)$

Pentru a ilustra rezultatele prezentate în paragraful precedent vom obține schema de proiecție definită de D_{10} -sistemul de puncte $D_{10}(1, 0)$ și unele rezultate referitoare la autosimilaritățile mulțimilor model care pot fi definite utilizând această schemă de proiecție.

Considerăm grupul diedral

$$D_{10} = \langle a, b \mid a^{10} = b^2 = (ab)^2 = e \rangle$$

și reprezentarea sa bidimensională uzuală

$$(10.2) \quad a(x, y) = (cx - sy, sx + cy) \quad b(x, y) = (x, -y)$$

unde

$$c = \cos(\pi/5) = (1 + \sqrt{5})/4$$

$$s = \sin(\pi/5) = \sqrt{5 - \sqrt{5}}/(2\sqrt{2}).$$

Fie

$$c' = \cos(2\pi/5) = (\sqrt{5} - 1)/4$$

$$s' = \sin(2\pi/5) = \sqrt{5 + \sqrt{5}}/(2\sqrt{2}).$$

Acțiunea generatorilor grupului D_{10} pe D_{10} -sistemul generat de mulțimea $S = \{(1, 0)\}$

$$C = D_{10}(1, 0) = \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, -e_1, -e_2, -e_3, -e_4, -e_5\}$$

unde $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (c', s')$, $e_3 = (-c, s)$, $e_4 = (-c, -s)$, $e_5 = (c', -s')$, poate fi descris cu ajutorul transformărilor

$$a = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 \\ -e_4 & -e_5 & -e_1 & -e_2 & -e_3 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 \\ e_1 & e_5 & e_4 & e_3 & e_2 \end{pmatrix}$$

care definesc reprezentarea ortogonală

$$a(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (-x_3, -x_4, -x_5, -x_1, -x_2)$$

$$b(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (x_1, x_5, x_4, x_3, x_2)$$

a lui D_{10} în \mathbb{E}_5 .

Vectorii $v_1 = \varrho(1, c', -c, -c, c')$, $v_2 = \varrho(0, s', s, -s, -s')$, unde $\varrho = \sqrt{2/5}$, formează o bază ortonormată a spațiului D_{10} -invariant

$$\mathbb{E}_5^{\parallel} = \{ \langle r, e_1 \rangle, \langle r, e_2 \rangle, \langle r, e_3 \rangle, \langle r, e_4 \rangle, \langle r, e_5 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_2 \}$$

și izometria (ea este un izomorfism de reprezentări)

$$\Xi: \mathbb{E}_2 \longrightarrow \mathbb{E}_5^{\parallel}: r \mapsto (\varrho \langle r, e_1 \rangle, \varrho \langle r, e_2 \rangle, \dots, \varrho \langle r, e_5 \rangle)$$

cu proprietatea $\Xi(1, 0) = v_1$, $\Xi(0, 1) = v_2$ ne permite să identificăm cele două spații.

Deoarece transformarea

$$\sigma = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & e_3 & e_4 & e_5 \\ e_1 & e_3 & e_5 & e_2 & e_4 \end{pmatrix}$$

satisface relațiile

$$\sigma a \sigma^{-1} = a^7 \quad \sigma b \sigma^{-1} = b$$

obținem $\sigma D_{10} \sigma^{-1} = D_{10}$. Conform teoremei (5.4.1) spațiul

$$\mathbb{E}_5^{\sigma} = \{ \langle r, \sigma e_1 \rangle, \langle r, \sigma e_2 \rangle, \dots, \langle r, \sigma e_5 \rangle \mid r \in \mathbb{E}_2 \}$$

este D_{10} -invariant și admite baza ortogonală

$$\{(1, -c, c', c', -c), (0, s, -s', s', -s)\}.$$

În acest caz, ortogonalul \mathbb{E}_6^\perp al spațiului \mathbb{E}_6^\parallel este suma directă a două subspații D_{10} -invariante ortogonale

$$\mathbb{E}_6^\perp = \mathbb{E}_{5,1}^\perp \oplus \mathbb{E}_{5,2}^\perp.$$

Vom nota cu π_1^\perp și π_2^\perp proiectorii corespunzători. Alegând $\mathbb{E}_{5,1}^\perp = \mathbb{E}_5^g$ obținem

$$\mathbb{E}_{5,2}^\perp = \{(x_1, x_2, \dots, x_5) \in \mathbb{E}_6 \mid x_1 = x_2 = \dots = x_5\}.$$

Prin calcul direct, rezultă

$$\pi^\parallel = \Theta(2/5, (\sqrt{5}-1)/10, -(\sqrt{5}+1)/10)$$

$$\pi_1^\perp = \Theta(2/5, -(\sqrt{5}+1)/10, (\sqrt{5}-1)/10)$$

$$\pi_2^\perp = \Theta(1/5, 1/5, 1/5)$$

unde

$$\Theta(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma & \gamma & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & \gamma & \gamma \\ \gamma & \beta & \alpha & \beta & \gamma \\ \gamma & \gamma & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & \gamma & \gamma & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Fie $\pi^\perp = \pi_1^\perp + \pi_2^\perp$, $\kappa = 1/q$ și fie $\mathcal{L} = \kappa \mathbb{Z}^6$. În acest caz $(\mathbb{E}_6^\parallel \oplus \mathbb{E}_6^\perp, \mathcal{L})$ nu este o schemă de proiecție deoarece $\pi^\parallel x = 0$ oricare ar fi $x = (x_1, x_2, \dots, x_6) \in \mathcal{L}$ astfel încât $x_1 = x_2 = \dots = x_5$. Conform rezultatelor prezentate în paragraful anterior rezultă că notând

$$q = \pi^\parallel + \pi_1^\perp \quad \mathcal{D} = q(\mathcal{L})$$

obținem schema de proiecție

$$\mathbb{E}_6^\parallel \xleftarrow{\pi^\parallel} \mathbb{E}_6^\parallel \oplus \mathbb{E}_{5,1}^\perp \xrightarrow{\pi_1^\perp} \mathbb{E}_{5,1}^\perp$$

$$\cup$$

$$\mathcal{D}$$

Se constată imediat că vectorii

$$w_1 = \left(\frac{4}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}\right) \quad w_2 = \left(-\frac{1}{5}, \frac{4}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}\right)$$

$$w_3 = \left(-\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, \frac{4}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}\right) \quad w_4 = \left(-\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, -\frac{1}{5}, \frac{4}{5}, -\frac{1}{5}\right).$$

formează o bază a rețelei \mathcal{D} din $E = \mathbb{E}_6^\parallel \oplus \mathbb{E}_{5,1}^\perp$

$$\mathcal{D} = \sum_{j=1}^4 \mathbb{Z}w_j.$$

Fie $p^\parallel : E \rightarrow E$, $p^\perp : E \rightarrow E$ proiectorii ortogonali corespunzători subspațiilor \mathbb{E}_6^\parallel și $\mathbb{E}_{5,1}^\perp$ ale lui E . Matricele lor în baza $\{w_1, w_2, w_3, w_4\}$ a lui \mathcal{D} sunt

$$p^\parallel = \mathcal{M}' \left(\frac{5 - \sqrt{5}}{10}, \frac{5 + \sqrt{5}}{10}, \frac{\sqrt{5}}{5} \right) \quad p^\perp = \mathcal{M}' \left(\frac{5 + \sqrt{5}}{10}, \frac{5 - \sqrt{5}}{10}, -\frac{\sqrt{5}}{5} \right)$$

unde

$$\mathcal{M}'(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma & 0 & -\gamma \\ 0 & \beta & \gamma & -\gamma \\ -\gamma & \gamma & \beta & 0 \\ -\gamma & 0 & \gamma & \alpha \end{pmatrix}$$

Elementele matricei $\lambda\pi_1 + \lambda'\pi_2$ sunt întregi dacă și numai dacă numerele

$$\begin{aligned} j &= \lambda \frac{5-\sqrt{5}}{10} + \lambda' \frac{5+\sqrt{5}}{10} \\ l &= \lambda \frac{5+\sqrt{5}}{10} + \lambda' \frac{5-\sqrt{5}}{10} \\ m &= \lambda \frac{\sqrt{5}}{5} - \lambda' \frac{\sqrt{5}}{5} \end{aligned}$$

sunt întregi. Rezultă

$$\lambda = \frac{l+j}{2} + \frac{l-j}{2}\sqrt{5} \quad \lambda' = \frac{l+j}{2} - \frac{l-j}{2}\sqrt{5} \quad m = l-j$$

și deci printre constantele de inflație ale mulțimilor model definite utilizând schema de proiecție obținută se află în funcție și de fereastra de selecție utilizată elementele mulțimii

$$\mathcal{I} = \left\{ \frac{l+j}{2} + \frac{l-j}{2}\sqrt{5} \mid (j, l) \in \mathbb{Z}^2, -1 \leq \frac{l+j}{2} - \frac{l-j}{2}\sqrt{5} \leq 1 \right\}.$$

Notând $\tau' = (1 - \sqrt{5})/2$ obținem

$$\mathcal{I} = \{ j + m\tau' \mid (j, m) \in \mathbb{Z}^2, -1 \leq j + m\tau' \leq 1 \}.$$

Rețeaua reciprocă corespunzătoare lui \mathcal{D} este

$$\mathcal{D}^* = \sum_{j=1}^4 \mathbb{Z}w'_j$$

unde

$$\begin{aligned} w'_1 &= (1, 0, 0, 0, -1) & w'_2 &= (0, 1, 0, 0, -1) \\ w'_3 &= (0, 0, 1, 0, -1) & w'_4 &= (0, 0, 0, 1, -1). \end{aligned}$$

Deoarece matricele lui p^{\parallel} și p^{\perp} în baza $\{w'_1, w'_2, w'_3, w'_4\}$ sunt

$$\pi_1 = \mathcal{M}'\left(\frac{5-\sqrt{5}}{10}, \frac{5+\sqrt{5}}{10}, \frac{\sqrt{5}}{5}\right) \quad \pi_2 = \mathcal{M}'\left(\frac{5+\sqrt{5}}{10}, \frac{5-\sqrt{5}}{10}, -\frac{\sqrt{5}}{5}\right)$$

unde

$$\mathcal{M}'(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & -\gamma & -\gamma \\ \gamma & \beta & \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & \beta & \gamma \\ -\gamma & -\gamma & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

obținem

$$\mathcal{I}^* = \mathcal{I} = \{ j + m\tau' \mid (j, m) \in \mathbb{Z}^2, -1 \leq j + m\tau' \leq 1 \}.$$

Capitolul 11

Cristale cu doi atomi în celula elementară

Este bine-cunoscut că în cazul cristalelor singoniei hexagonale există pe lângă descrierea uzuală o descriere complementară care utilizează sisteme de coordonate cu patru axe [Sir]. Modelul de cristal periodic obținut în paragraful 8.4 prin metoda proiecției benzii este utilizabil în cazul cristalelor cu structura diamantului și în general a cristalelor cu doi atomi în celula elementară. El corespunde intru-totul unei descrieri cu ajutorul unor sisteme cu patru axe a acestor cristale similare descrierii utilizate pentru cristalele singoniei hexagonale. În ambele cazuri axa suplimentară simplifică descrierea transformărilor de simetrie și expresiile matematice ale invarianților. În acest capitol și în următorul vom prezenta unele dintre facilitățile matematice oferite de acest model în încercarea de a demonstra utilitatea lui ca model complementar celui clasic.

11.1 Un model matematic

Fie \mathcal{E}_3 mulțimea tuturor punctelor spațiului fizic identificat cu ajutorul bijecției

$$\mathcal{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 : P \mapsto \vec{OP}$$

cu spațiul euclidian

$$\mathbb{E}_3 = \{ \vec{OP} \mid P \in \mathcal{E}_3 \}$$

al tuturor vectorilor având ca origine un punct fixat $O \in \mathcal{E}_3$ și fie $e_1, e_2, e_3, e_4 \in \mathbb{E}_3$ patru puncte necoplanare. Utilizând vectorii e_1, e_2, e_3, e_4 și vectorii $\bar{e}_1 = -e_1, \bar{e}_2 = -e_2, \bar{e}_3 = -e_3, \bar{e}_4 = -e_4$ vom genera o mulțime discretă $\mathcal{M} \subset \mathcal{E}_3$ care poate fi utilizată ca model pentru cristalele cu doi atomi în celula elementară. Construcția lui \mathcal{M} se face din aproape în aproape în modul următor. Punctul O aparține lui \mathcal{M} . Alegând punctul O ca punct inițial construim reprezentanții $\vec{OA}_1, \vec{OA}_2, \vec{OA}_3, \vec{OA}_4$ ai vectorilor e_1, e_2, e_3, e_4 . Extremitățile A_1, A_2, A_3, A_4

ale acestor segmente orientate aparțin mulțimii \mathcal{M} și alegându-l pe fiecare dintre ele ca punct inițial construim reprezentanți ai vectorilor $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3, \bar{e}_4$. Extremitățile ultimelor segmente construite aparțin lui \mathcal{M} , și alegându-l pe fiecare dintre ele ca punct inițial construim reprezentanți ai vectorilor e_1, e_2, e_3, e_4 . Apoi continuăm în același mod construind alternativ reprezentanți ai vectorilor e_1, e_2, e_3, e_4 și reprezentanți ai vectorilor $\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3, \bar{e}_4$ alegând ca punct inițial fiecare dintre ultimele puncte obținute. Punctul O împreună cu extremitățile tuturor segmentelor astfel obținute formează mulțimea \mathcal{M} .

Fiecare punct P aparținând mulțimii \mathcal{M} astfel obținute poate fi descris cu ajutorul unei secvențe formale (Fig. 21)

$$e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}$$

unde $i_1, i_2, \dots, i_k \in \{1, 2, 3, 4\}$, $e'_{i_k} = e_{i_k}$ pentru k impar, $e_{i_k} = \bar{e}_{i_k}$ pentru k par, astfel încât

$$\vec{OP} = e_{i_1} + \bar{e}_{i_2} + e_{i_3} + \bar{e}_{i_4} + \dots + e'_{i_k}.$$

Două secvențe (11.1) le numim *echivalente* dacă una dintre ele se poate obține plecând de la cealaltă cu ajutorul transformărilor

$$\dots e_i \bar{e}_j e_k \dots \longrightarrow \dots e_k \bar{e}_j e_i \dots$$

(permutarea a două componente vecine nebarate),

$$\dots \bar{e}_i e_j \bar{e}_k \dots \longrightarrow \dots \bar{e}_k e_j \bar{e}_i \dots$$

(permutarea a două componente vecine barate),

$$\dots e_i \bar{e}_j e_j \bar{e}_k \dots \longrightarrow \dots e_i \bar{e}_k \dots \text{ sau } \dots \bar{e}_i e_j \bar{e}_j e_k \dots \longrightarrow \dots \bar{e}_i e_k \dots$$

(eliminarea unei secvențe de forma $\bar{e}_j e_j$ ou $e_j \bar{e}_j$),

$$\dots e_i \bar{e}_k \dots \longrightarrow \dots e_i \bar{e}_j e_j \bar{e}_k \dots \text{ sau } \dots \bar{e}_i e_k \dots \longrightarrow \dots \bar{e}_i e_j \bar{e}_j e_k \dots$$

(inserarea unei secvențe de forma $\bar{e}_j e_j$ sau $e_j \bar{e}_j$). Această relație este o relație de echivalență și ea ne permite să divizăm mulțimea \mathcal{F} a tuturor secvențelor (11.1) în clase de echivalență.

Secvențele $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e_{i_{2k-1}} \bar{e}_{i_{2k}}$ cu proprietatea

$$\{i_1, i_3, \dots, i_{2k-1}\} \cap \{i_2, i_4, \dots, i_{2k}\} = \emptyset \quad i_1 \leq i_3 \leq \dots \leq i_{2k-1} \quad i_2 \leq i_4 \leq \dots \leq i_{2k}$$

și secvențele $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots \bar{e}_{i_{2k}} e_{i_{2k+1}}$ cu proprietatea

$$\{i_1, i_3, \dots, i_{2k+1}\} \cap \{i_2, i_4, \dots, i_{2k}\} = \emptyset \quad i_1 \leq i_3 \leq \dots \leq i_{2k+1} \quad i_2 \leq i_4 \leq \dots \leq i_{2k}$$

le vom numi *secvențe canonice*. Fiecare clasă de echivalență conține o secvență canonică și numai una.

Deoarece două secvențe echivalente descriu același punct al lui \mathcal{M} , putem defini aplicația

$$\mathcal{F}/\sim \longrightarrow \mathcal{M} : e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k} \mapsto e_{i_1} + \bar{e}_{i_2} + e_{i_3} + \bar{e}_{i_4} + \dots + e'_{i_k}.$$

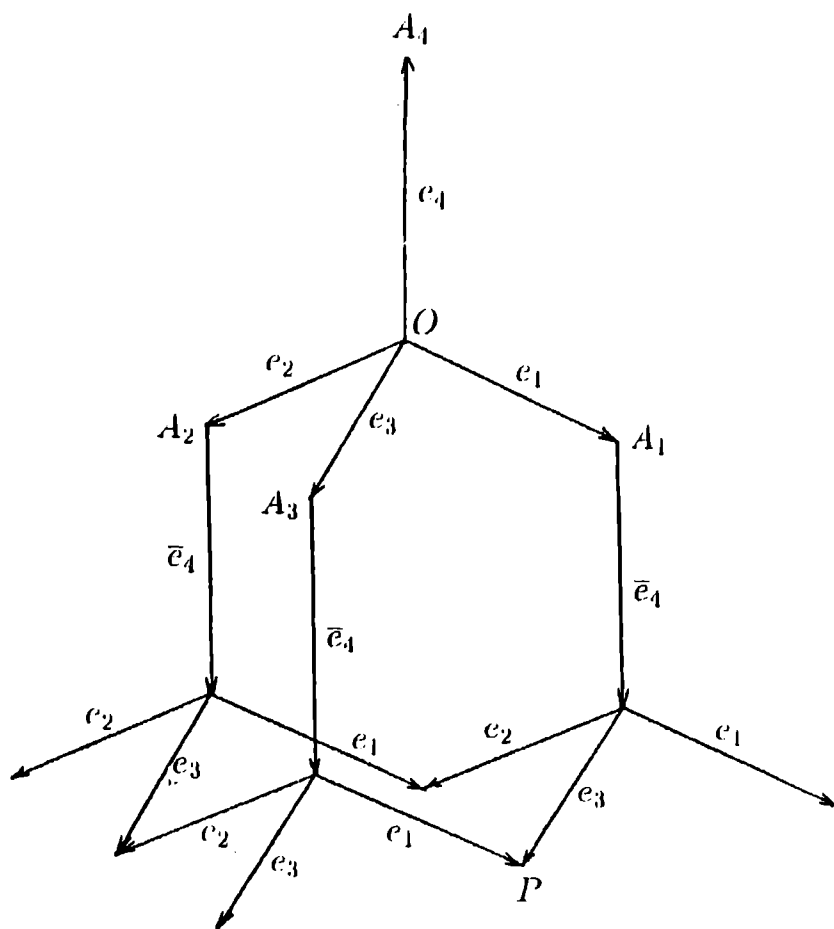


Fig. 21. Un model matematic pentru cristalele cu doi atomi in celula elementară.
 Punctul P poate fi descris utilizand secvențele formale echivalente
 $e_1e_3e_3$, $e_3\bar{e}_4e_1$, $e_2\bar{e}_4e_1\bar{e}_2e_1$, etc

În cazul în care această aplicație este o bijecție, singurul considerat în continuare, mulțimea \mathcal{F}/\sim poate fi utilizată ca un model matematic pentru \mathcal{M} . Pentru a indica un punct al lui \mathcal{M} este suficient să se indice un reprezentant al clasei de echivalență corespunzătoare (Fig. 13).

Notând $a_1 = e_1 - e_4$, $a_2 = e_2 - e_4$, $a_3 = e_3 - e_4$, se obține

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 \cup \mathcal{M}_1$$

unde \mathcal{M}_0 este rețeaua

$$\mathcal{M}_0 = \{ \alpha a_1 + \beta a_2 + \gamma a_3 \mid \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z} \}$$

și

$$\mathcal{M}_1 = e_4 + \mathcal{M}_0 = \{ e_4 + \alpha a_1 + \beta a_2 + \gamma a_3 \mid \alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{Z} \}.$$

În cazul în care e_4 este conținut în paralelipipedul determinat de a_1 , a_2 , a_3 , mulțimea \mathcal{M} poate fi privită ca un model pentru cristalele periodice cu doi atomi în celula elementară.

Fie $E(3) = O(3) \times \mathbb{R}^3 = \{ (h, v) \mid h \in O(3), v \in \mathbb{R}^3 \}$ grupul izometriilor afine

$$(h, v) : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 : x \mapsto hx + v$$

ale spațiului \mathbb{E}_3 ,

$$I : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad Ix = x$$

$$i : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad ix = -x$$

și fie

$$G = \{ g \in E(3) \mid g(\mathcal{M}) = \mathcal{M} \}$$

grupul de simetrie al lui \mathcal{M} . Se poate constata că $(i, e_4) \in G$ și că

$$T = \{ (I, v) \mid v \in \mathcal{M}_0 \} \subset G$$

este subgrupul lui G format din toate translațiile care lasă mulțimea \mathcal{M} invariantă. Grupul G se poate scrie sub forma

$$G = \bigcup_{h \in H} T \circ (h, 0) \cup \bigcup_{h \in H} T \circ (i \circ h, e_4)$$

unde H este subgrupul lui $O(3)$ care lasă invariantă mulțimea $\{e_1, e_2, e_3, e_4\}$

$$H = \{ h \in O(3) \mid h(\{e_1, e_2, e_3, e_4\}) = \{e_1, e_2, e_3, e_4\} \}.$$

Oricare ar fi $h \in H$ există o permutare $\sigma_h : \{1, 2, 3, 4\} \longrightarrow \{1, 2, 3, 4\}$ astfel încât $h(e_j) = e_{\sigma_h(j)}$, oricare ar fi $j \in \{1, 2, 3, 4\}$. Fie $\Sigma = \{ \sigma_h \mid h \in H \}$. Grupul punctual corespunzător lui G este $G_0 = H \times \{I, i\}$.

Dacă $P \in \mathcal{M}$ este punctul descris de $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots \bar{e}_{i_{2k}}$ (resp. $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e_{i_{2k+1}}$), atunci punctele corespunzătoare secvențelor

$$e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots \bar{e}_{i_{2k}} e_j \quad (\text{resp. } e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e_{i_{2k+1}} \bar{e}_j)$$

unde $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, reprezintă *primii vecini* ai lui P .

11.2 Grupuri spațiale descrise cu ajutorul generatorilor și a relațiilor

Modelul matematic prezentat în paragraful anterior ne permite să obținem o descriere abstractă (cu ajutorul generatorilor și a relațiilor [Lan, Cox]) pentru unele grupuri spațiale.

1. Fie $S = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ o mulțime, și fie S' o altă mulțime având n elemente notate cu $a_1^{-1}, a_2^{-1}, \dots, a_n^{-1}$ astfel încât $S \cap S' = \emptyset$. Relația

$$(g_1, g_2, \dots, g_j, g_{j+1}, \dots, g_k) \sim (g_1, g_2, \dots, g_{j-1}, g_{j+2}, \dots, g_k) \quad \text{daca} \quad g_{j+1} = g_j^{-1}$$

unde $(a_i^{-1})^{-1} = a_i$, este o relație de echivalență pe mulțimea

$$S = \{ (g_1, g_2, \dots, g_k) \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in S \cup S', k \in \mathbb{N} \}$$

și notând cu $g_1 g_2 \dots g_k$ clasa de echivalență corespunzătoare lui (g_1, g_2, \dots, g_k) , legea de compoziție

$$g_1 g_2 \dots g_j \cdot h_1 h_2 \dots h_k = g_1 g_2 \dots g_j h_1 h_2 \dots h_k$$

definește o structură de grup pe mulțimea factor

$$\langle S \rangle = S / \sim$$

În particular, inversul elementului $g_1 g_2 \dots g_k$ este $g_k^{-1} g_{k-1}^{-1} \dots g_1^{-1}$, iar elementul neutru este $e = g_1 g_1^{-1} = g_1 g_2 g_2^{-1} g_1^{-1} = \dots$. Acest grup conținând mulțimea S se numește [Lan] *grupul liber generat de S* .

Fie $R \subset \langle S \rangle$. Prin *grupul definit de mulțimea de generatori S și mulțimea de relații R* se înțelege grupul factor

$$\langle S \mid R \rangle = \langle S \rangle / N(R)$$

unde $N(R)$ este cel mai mic subgrup invariant al lui $\langle S \rangle$ care conține pe R . În cazul în care $S = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ și $R = \{b_1, b_2, \dots, b_m\}$ el va fi notat cu

$$\langle a_1, a_2, \dots, a_n \mid b_1, b_2, \dots, b_m \rangle$$

Dacă pentru fiecare $a_i \in S$ există $k_i \in \mathbb{N}$, $k_i \geq 1$, astfel încât $a_i^{k_i} \in R$, atunci

$$a_i^{-1} = a_i^{k_i-1}$$

adică, pentru fiecare element al grupului $\langle S \mid R \rangle$ se poate alege un reprezentant conținând numai elemente din S . De exemplu [Vai, Int]:

- grupul

$$\langle a \mid a^3 \rangle = \{ e, a \}$$

este izomorf cu grupurile $\bar{3} = C_3 = S_2$, $2 = C_2$, $m = C_{1h} = C_2$,

- grupul

$$\langle a \mid a^3 \rangle = \{ e, a, a^2 \}$$

este izomorf cu grupul $3 = C_3$,

- grupul

$$\langle a, b \mid a^2, b^2, (ab)^2 \rangle = \{ e, a, b, ab \}$$

este izomorf cu grupurile $2/m = C_{2h}$, $mm2 = C_{2v}$, $222 = D_2$,

- grupul

$$\langle a, b \mid a^3, b^2, (ab)^2 \rangle = \{ e, a, a^2, b, ab, a^2b \}$$

este izomorf cu grupurile $32 = D_3$, $3m = C_{3v}$,

- grupul

$$\langle a, b \mid a^6, b^2, (ab)^2 \rangle = \{ e, a, a^2, a^3, a^4, a^5, b, ab, a^2b, a^3b, a^4b, a^5b \}$$

este izomorf cu grupurile $\bar{3}m = D_{3d}$, $\bar{6}m2 = D_{3h}$, $6mm = C_{6v}$, $622 = D_6$,

- grupul

$$\langle a, b \mid a^4, b^2, (ab)^3 \rangle$$

conține 24 de elemente și este izomorf cu grupurile $432 = O$, $\bar{4}3m = T_d$,

- grupul

$$\langle a, b \mid a^4, b^6, (ab)^2 \rangle$$

conține 48 de elemente și este izomorf cu grupul $m\bar{3}m = O_h$.

2. În cazul $H = \{I\}$, grupul G este generat de transformările

$$\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4 : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \quad \tau_j(x) = -x + e_j$$

adică,

$$G = \{ g_1 g_2 \dots g_k : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in \{ \tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4 \} \},$$

și aplicația

$$\mathcal{M} \longrightarrow G : e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k} \mapsto \tau_{i_1} \tau_{i_2} \dots \tau_{i_k}$$

este o bijecție cu proprietatea

$$(11.1) \quad e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k} = 0 \quad \text{daca si numai daca} \quad \tau_{i_1} \tau_{i_2} \dots \tau_{i_k} = I.$$

În particular,

$$\tau_j (e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}) = e_j \bar{e}_{i_1} e_{i_2} \bar{e}_{i_3} e_{i_4} \dots e'_{i_k}$$

unde $e'_{i_k} = e_{i_k}$ pentru k par, $e'_{i_k} = \bar{e}_{i_k}$ pentru k impar, și

$$\tau_1^2 = \tau_2^2 = \tau_3^2 = \tau_4^2 = I, \quad \tau_i \tau_j \tau_k = \tau_k \tau_j \tau_i$$

adică, $(\tau_i \tau_j \tau_k)^2 = I$, oricare ar fi $i, j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Grupul G este izomorf cu grupul definit în termeni de generatori și relații

$$\mathcal{G} = \left\langle t_1, t_2, t_3, t_4 \mid \begin{array}{l} t_1^2, t_2^2, t_3^2, t_4^2, \\ (t_1 t_2 t_3)^2, (t_1 t_2 t_4)^2, (t_1 t_3 t_4)^2, (t_2 t_3 t_4)^2 \end{array} \right\rangle.$$

Într-adevăr, deoarece fiecare element al lui \mathcal{G} se poate scrie în mod unic sub forma $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k}$ astfel încât $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}$ să fie o secvență canonică, rezultă că morfismul surjectiv definit de formula

$$\psi : \mathcal{G} \longrightarrow G \quad \psi(t_j) = \tau_j$$

este un izomorfism. Într-adevăr, dacă $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k}$ este astfel încât $\psi(t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k}) = I$, adică, astfel încât $\tau_{i_1} \tau_{i_2} \dots \tau_{i_k} = I$, atunci conform relației (11.1) avem

$$e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k} = 0.$$

Prin urmare, oricare ar fi $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, numărul de apariții ale lui t_j în $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k}$ pe poziții de indice impar coincide cu numărul de apariții ale lui t_j pe poziții de indice par. Relațiile

$$(t_1 t_2 t_3)^2 = (t_1 t_2 t_4)^2 = (t_1 t_3 t_4)^2 = (t_2 t_3 t_4)^2 = e$$

arată că dacă se permută între ele simbolurile situate pe poziții pare sau dacă se permută între ele simbolurile situate pe poziții impare, atunci se trece de la un reprezentant al unui element al lui \mathcal{G} la un alt reprezentant. Deoarece pentru fiecare $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, numărul de apariții ale lui t_j în $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k}$ este un număr par și prin schimbare de reprezentant se poate trece la un reprezentant în care simbolurile identice ocupă poziții succesive, relațiile

$$t_1^2 = t_2^2 = t_3^2 = t_4^2 = e$$

arată că

$$t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k} = e$$

adică nucleul lui ψ este $\{e\}$.

Conform notațiilor uzuale [Int] $H = I = C_1$, $G_0 = \bar{I} = \{I\}$, și $G = P\bar{I} = C_4^1$.

3. Dacă singurul element de simetrie al mulțimii $\{e_1, e_2, e_3, e_4\}$ est un plan de simetrie, atunci H este generat de transformarea corespunzătoare $g : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3$. Alegând cazul în care planul de simetrie este planul determinat de e_2, e_3 , obținem $g(e_1) = e_4$, $g(e_4) = e_1$, $g(e_2) = e_2$, $g(e_3) = e_3$. Grupul $\langle g \rangle$ este grupul generat de transformările $g, \tau_1, \tau_2, \tau_3$, adică,

$$G = \{ g_1 g_2 \dots g_k : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in \{g, \tau_1, \tau_2, \tau_3\} \},$$

și

$$g^2 = I, \quad \tau_2 = g\tau_2g, \quad \tau_3 = g\tau_3g, \quad \tau_4 = g\tau_1g, \\ (\tau_1\tau_2\tau_3)^2 = (\tau_1\tau_2g\tau_1g)^2 = (\tau_1\tau_3g\tau_1g)^2 = (\tau_2\tau_3g\tau_1g)^2 = I.$$

Grupul G este izomorf cu grupul

$$\mathcal{G} = \left\langle a, t_1, t_2, t_3 \mid \begin{array}{l} a^2, t_1^2, t_2^2, t_3^2, (at_2)^2, (at_3)^2, \\ (t_1t_2t_3)^2, (t_1t_2at_1a)^2, (t_1t_3at_1a)^2, (t_2t_3at_1a)^2 \end{array} \right\rangle.$$

Într-adevăr, punând $t_4 = at_1a$, fiecare element al lui \mathcal{G} se poate scrie în mod unic sub forma $t_{i_1}t_{i_2}\dots t_{i_k}c$ astfel încât $c \in \langle a \mid a^2 \rangle$ și $e_{i_1}\bar{e}_{i_2}e_{i_3}\bar{e}_{i_4}\dots e'_{i_k}$ să fie o secvență canonică, ceea ce arată că morfismul surjectiv definit de formula

$$\psi : \mathcal{G} \longrightarrow G, \quad \psi(a) = g, \quad \psi(t_j) = \tau_j$$

este un izomorfism. În notații uzuale $H = m = C_{1h}$, $G_0 = 2/m = C_{2h}$, și $G = P2/m = C_{2h}^1$.

4. Dacă singurul element de simetrie al mulțimii $\{e_1', e_2, e_3, e_4\}$ este o axă de rotație de ordinul doi, atunci H este generat de transformarea corespunzătoare $g : \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3$. În cazul în care această axă este aleasă astfel încât $g(e_1) = e_3$, $g(e_2) = e_4$, grupul G este generat de transformările g, τ_1, τ_2 , adică,

$$G = \{ g_1g_2\dots g_k : \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3 \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in \{g, \tau_1, \tau_2\} \},$$

și

$$g^2 = I, \quad \tau_3 = g\tau_1g, \quad \tau_4 = g\tau_2g, \\ (\tau_1\tau_2g\tau_1g)^2 = (\tau_1\tau_2g\tau_2g)^2 = (\tau_1g\tau_1\tau_2g)^2 = (\tau_2g\tau_1\tau_2g)^2 = I.$$

Grupul G este izomorf cu grupul

$$\mathcal{G} = \left\langle a, t_1, t_2 \mid \begin{array}{l} a^2, t_1^2, t_2^2, \\ (t_1t_2at_1a)^2, (t_1t_2at_2a)^2, (t_1at_1t_2a)^2, (t_2at_1t_2a)^2 \end{array} \right\rangle.$$

Într-adevăr, punând $t_3 = at_1a$, $t_4 = at_2a$, fiecare element al grupului \mathcal{G} se poate scrie în mod unic sub forma $t_{i_1}t_{i_2}\dots t_{i_k}c$ astfel încât $c \in \langle a \mid a^2 \rangle$ și $e_{i_1}\bar{e}_{i_2}e_{i_3}\bar{e}_{i_4}\dots e'_{i_k}$ să fie o secvență canonică, ceea ce arată că morfismul surjectiv definit de formula

$$\psi : \mathcal{G} \longrightarrow G, \quad \psi(a) = g, \quad \psi(t_j) = \tau_j$$

este un izomorfism. În notații uzuale $H = 2 = C_2$, $G_0 = 2/m = C_{2h}$, și $G = P2/c = C_{2h}^4$.

5. Dacă singurele elemente de simetrie ale mulțimii $\{e_1, e_2, e_3, e_4\}$ sunt o axă de rotație de ordinul trei și trei plane de simetrie conținând această axă, atunci H este generat de rotația corespunzătoare $g : \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3$ și de simetria $h : \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3$ corespunzătoare unuia dintre planele de simetrie. În cazul în care aceste elemente de simetrie sunt alese astfel încât $g(e_1) = e_1$, $g(e_2) = e_3$, $g(e_3) = e_4$, $h(e_1) = e_1$, $h(e_2) = e_2$, $h(e_3) = e_4$, grupul G este generat de g, h, τ_1, τ_2 , adică,

$$G = \{ g_1g_2\dots g_k : \mathbb{E}_3 \rightarrow \mathbb{E}_3 \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in \{g, h, \tau_1, \tau_2\} \}$$

și

$$g^3 = h^2 = I, \quad \tau_1 = h\tau_1h, \quad \tau_2 = h\tau_2h, \quad \tau_3 = g\tau_2g^2, \quad \tau_4 = g^2\tau_2g, \quad g\tau_1g^2 = \tau_1,$$

$$(\tau_1 \tau_2 g \tau_2 g^2)^2 = (\tau_1 \tau_2 g^2 \tau_2 g)^2 = (\tau_1 g \tau_2 g \tau_2 g)^2 = (\tau_2 g \tau_2 g \tau_2 g)^2 = I.$$

În acest caz grupul G este izomorf cu grupul

$$G = \left\langle a, b, t_1, t_2 \mid \begin{array}{l} a^3, b^2, (ab)^2, t_1^2, t_2^2, at_1 a^2 t_1, (bt_1)^2, (bt_2)^2, \\ (t_1 t_2 a t_2 a^2)^2, (t_1 t_2 a^2 t_2 a)^2, (t_1 a t_2 a t_2 a)^2, (t_2 a t_2 a t_2 a)^2 \end{array} \right\rangle.$$

Într-adevăr, $bat_2 a^2 b = a^2 t_2 a$, și punând $t_3 = at_2 a^2$, $t_4 = a^2 t_2 a$, fiecare element al lui G se poate scrie în mod unic sub forma $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k} c$ astfel încât $c \in \langle a, b \mid a^3, b^2, (ab)^2 \rangle$ și $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}$ să fie o secvență canonică, ceea ce arată că morfismul surjectiv definit de formula

$$\psi: G \longrightarrow G, \quad \psi(a) = g, \quad \psi(b) = h, \quad \psi(t_j) = \tau_j$$

este un izomorfism. În notații uzuale $H = 3m = C_{3v}$, $G_0 = \bar{3}m = D_{3d}$, și $G = P\bar{3}1m = D_{3d}^2$.

6. Dacă $A_1 A_2 A_3 A_4$ este un tetraedru regulat cu centrul O atunci H este grupul complet al tetraedrului T_d , și el este generat de o rotație-inversie de ordinul patru și de reflexia într-un plan. Alegând aceste transformări $g, h: \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3$ astfel încât

$$\begin{array}{lll} g(e_1) = e_2 & g(e_2) = e_3 & g(e_3) = e_4 \\ h(e_1) = e_4 & h(e_2) = e_2 & h(e_3) = e_3 \end{array}$$

grupul G este generat de g, h, τ_1 , adică,

$$G = \{ g_1 g_2 \dots g_k : \mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_3 \mid g_1, g_2, \dots, g_k \in \{g, h, \tau_1\} \},$$

și

$$g^4 = h^2 = (gh)^3 = \tau_1^2 = I, \quad \tau_1 = gh\tau_1(gh)^2, \quad \tau_2 = g\tau_1 g^3, \quad \tau_3 = g^2 \tau_1 g^2, \quad \tau_4 = g^3 \tau_1 g,$$

$$(\tau_1 g \tau_1 g \tau_1 g^2)^2 = (\tau_1 g \tau_1 g^2 \tau_1 g)^2 = (\tau_1 g^2 \tau_1 g \tau_1 g)^2 = (g \tau_1 g \tau_1 g \tau_1 g)^2 = I.$$

Grupul G este izomorf cu grupul

$$(11.2F) = \left\langle a, b, t \mid \begin{array}{l} a^4, b^2, (ab)^3, t^2, tabt(ab)^2, (ba^2 ta^2)^2, \\ (tatata^2)^2, (tata^2 ta)^2, (ta^2 lata)^2, (atatata)^2 \end{array} \right\rangle.$$

Intr-adevăr, $btb = a^3 ta$, $bata^3 b = ata^3$, $ba^2 ta^2 b = a^2 ta^2$, $ba^3 tab = t$, și punând $t_1 = t$, $t_2 = ata^3$, $t_3 = a^2 ta^2$, $t_4 = a^3 ta$, fiecare element al lui G se poate scrie în mod unic sub forma $t_{i_1} t_{i_2} \dots t_{i_k} c$ astfel încât $c \in \langle a, b \mid a^4, b^2, (ab)^3 \rangle$ și $e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}$ să fie o secvență canonică, ceea ce arată că morfismul definit prin formula

$$\psi: G \longrightarrow G, \quad \psi(a) = g, \quad \psi(b) = h, \quad \psi(t) = \tau_1$$

este un izomorfism. În acest caz $H = \bar{4}3m = T_d$, $G_0 = m\bar{3}m = O_h$, și $G = Fd\bar{3}m = O_h^7$.

Descrierea grupului O_h^7 cu ajutorul generatorilor și a relațiilor va fi utilizată (teoremele 12.1.1 și 12.3.1) pentru a defini o reprezentare afină a grupului O_h^7 în \mathbb{E}_4 și o reprezentare liniară în \mathbb{E}_4^{\parallel} .

11.3 Cristale privite ca varietăți topologice discrete

Fiecare element $(P, P_1, P_2, P_3, P_4) \in \mathcal{M}^5$ cu proprietatea că P_1, P_2, P_3, P_4 sunt cei patru vecini cei mai apropiați ai lui P , va fi numit *sistem de referință* al lui \mathcal{M} . În particular, (O, A_1, A_2, A_3, A_4) aparține mulțimii \mathcal{R} a tuturor sistemelor de referință ale lui \mathcal{M} . Două sisteme de referință $\alpha = (P, P_1, P_2, P_3, P_4)$, $\beta = (Q, Q_1, Q_2, Q_3, Q_4) \in \mathcal{R}$ se numesc echivalente, și scriem $\alpha \sim \beta$, dacă

$$\|P\vec{P}_j\| = \|Q\vec{Q}_j\|, \quad \|P_j\vec{P}_k\| = \|Q_j\vec{Q}_k\|$$

oricare ar fi $j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$. Se poate observa că

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_0 &:= \{ \alpha \in \mathcal{R} \mid \alpha \sim (O, A_1, A_2, A_3, A_4) \} \\ &= \{ (g(O), g(A_1), g(A_2), g(A_3), g(A_4)) \mid g \in G \}. \end{aligned}$$

Fie

$$(11.3) \quad \mathbb{M} = \{ x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{Z}^4 \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \in \{0; 1\} \}.$$

Asociind la fiecare secvență $e_i, \bar{e}_i, e_i, \bar{e}_i, \dots, e'_k \in \mathcal{F}$ elementul $(x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{M}$, unde x_i este diferența dintre numărul de apariții ale lui e_i și numărul de apariții ale lui \bar{e}_i , se obține o bijecție

$$\varphi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{M}.$$

\mathbb{M} poate fi privit ca fiind reuniunea a două rețele situate în două hiperplane ale lui \mathbb{R}^4 perpendiculare pe vectorul $(1, 1, 1, 1)$

$$\mathbb{M} := \mathbb{M}_0 \cup \mathbb{M}_1$$

unde

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_0 &= \varphi(\mathcal{M}_0) = \left\{ x \in \mathbb{M} \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0 \right\} \\ \mathbb{M}_1 &= \varphi(\mathcal{M}_1) = \left\{ x \in \mathbb{M} \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \right\}. \end{aligned}$$

Mulțimea \mathcal{M} a fost construită plecând de la sistemul de referință (O, A_1, A_2, A_3, A_4) . Ea poate fi reobținută prin metoda prezentată plecând de la un sistem de referință arbitrar $\alpha = (P, P_1, P_2, P_3, P_4) \in \mathcal{R}_0$, adică plecând de la P în loc de O și alegând $e_1 = P\vec{P}_1$, $e_2 = P\vec{P}_2$, $e_3 = P\vec{P}_3$, $e_4 = P\vec{P}_4$. Vom desemna prin $\varphi_\alpha : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{M}$ bijecția corespunzătoare.

Teorema 11.3.1 *Mulțimea de bijecții*

$$\{ \varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} \mid \alpha, \beta \in \mathcal{R}_0 \}$$

este un grup izomorf cu G , general de transformările

$$\begin{array}{ll} \Phi_1 : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} & \Phi_1(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1 + 1, -x_2, -x_3, -x_4) \\ \Phi_2 : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} & \Phi_2(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1, -x_2 + 1, -x_3, -x_4) \\ \Phi_3 : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} & \Phi_3(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1, -x_2, -x_3 + 1, -x_4) \\ \Phi_4 : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} & \Phi_4(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1, -x_2, -x_3, -x_4 + 1) \\ \Phi_\sigma : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} & \Phi_\sigma(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_{\sigma(1)}, x_{\sigma(2)}, x_{\sigma(3)}, x_{\sigma(4)}) \end{array}$$

unde $\sigma \in \Sigma$.

Demonstrație: Dacă originea Q a lui $\beta = (Q, Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ este unul dintre primii vecini ai originii P a lui $\alpha = (P, P_1, P_2, P_3, P_4)$ și $\tilde{Q}Q_j$ este paralel cu $\tilde{P}P_j$ oricare ar fi $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, atunci

$$\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} \in \{ \Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, \Phi_4 \}.$$

Dacă α și β au aceeași origine, atunci

$$\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} \in \{ \Phi_\sigma \mid \sigma \in \Sigma \}.$$

Oricare ar fi $\alpha, \beta \in \mathcal{R}_0$, bijecția $\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1}$ poate fi obținută compunând unele dintre bijecțiile Φ_j și Φ_σ . \square

Vom identifica cele două grupuri izomorfe, adică vom considera uneori că

$$(11.4) \quad G = \{ \varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M} \mid \alpha, \beta \in \mathcal{R}_0 \}.$$

Familia de bijecții

$$(11.5) \quad \mathcal{A} = \{ \varphi_\alpha : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{M} \mid \alpha \in \mathcal{R}_0 \}$$

privită ca un G -atlas de hărți globale, definește pe \mathcal{M} o structură de G -varietate discretă, modelată cu ajutorul spațiului numeric \mathbb{M} . Atlasul \mathcal{A} ne permite să transportăm pe \mathcal{M} obiectele matematice G -invariante care pot fi definite utilizând spațiul \mathbb{M} .

Dacă privim \mathcal{M} și \mathbb{M} ca spații topologice înzestrate cu topologia discretă, descrierea prezentată devine caz particular pentru teoria varietăților topologice, ceea ce ne permite să ne încadrăm într-un formalism matematic general, bine studiat. Privind pe \mathcal{M} ca G -varietate topologică putem profita de metodele matematice și ideile dezvoltate în jurul acestei noțiuni.

Aplicația

$$(11.6) \quad \delta : \mathbb{M} \times \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{N}, \quad \delta(x, y) = \sum_{j=1}^4 |x_j - y_j|$$

este o distanță G -invariantă pe mulțimea \mathbb{M} , adică,

$$\delta(gx, gy) = \delta(x, y)$$

oricare ar fi $x, y \in \mathbb{M}$, $g \in G$. Deoarece $\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1} \in G$, se obține

$$\begin{aligned} \delta(\varphi_\alpha(P), \varphi_\alpha(Q)) &= \delta((\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1})(\varphi_\alpha(P)), (\varphi_\beta \circ \varphi_\alpha^{-1})(\varphi_\alpha(Q))) \\ &= \delta(\varphi_\beta(P), \varphi_\beta(Q)) \end{aligned}$$

oricare ar fi $\alpha, \beta \in \mathcal{R}_0$, $P, Q \in \mathcal{M}$. Această relație ne permite să definim aplicația

$$(11.7) \quad \delta : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{N} \quad \delta(P, Q) = \delta(\varphi_\alpha(P), \varphi_\alpha(Q))$$

cu ajutorul unei hărți $\varphi_\alpha : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{M}$, și independent de harta aleasă.

Într-un mod similar, aplicația G -invariantă

$$N : \mathbb{M} \times \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{N} \quad N(x, y) = \frac{\left(\sum_{x_j > y_j} (x_j - y_j)\right)! \left(\sum_{x_j < y_j} (y_j - x_j)\right)!}{\prod_{j=1}^4 (|x_j - y_j|)!}$$

ne permite să definim aplicația

$$(11.8) \quad N : \mathcal{M} \times \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{N} \quad N(P, Q) = N(\varphi_\alpha(P), \varphi_\alpha(Q))$$

cu ajutorul unei hărți $\varphi_\alpha : \mathcal{M} \longrightarrow \mathbb{M}$, și independent de harta utilizată.

Teorema 11.3.2 Dacă $P, Q \in \mathcal{M}$, atunci $\delta(P, Q)$ reprezintă [C01, C02] numărul minim de segmente elementare (adică segmente care unesc puncte vecine ale lui \mathcal{M}) care trebuie parcurse pentru a ajunge în Q plecând din P , și $N(P, Q)$ este numărul de traiectorii de "lungime" (număr de segmente elementare) minimă $\delta(P, Q)$ care unesc punctele P și Q .

Demonstrație: Deoarece definițiile lui $\delta(P, Q)$ și $N(P, Q)$ sunt independente de harta utilizată putem alege o hartă convenabilă, și anume o hartă definită de un sistem de referință cu originea în P . În raport cu un astfel de sistem, punctul Q poate fi descris cu ajutorul unei secvențe formale

$$\gamma = e_{i_1} \bar{e}_{i_2} e_{i_3} \bar{e}_{i_4} \dots e'_{i_k}$$

care poate fi aleasă astfel încât pentru orice $j \in \{1, 2, 3, 4\}$, cel mult unul dintre simbolurile e_j et \bar{e}_j să apară în γ . O astfel de secvență corespunde la o traiectorie minimală și trecerea între două astfel de secvențe se face prin permutarea simbolurilor. Evident, în raport cu harta aleasă $\varphi(P) = (0, 0, 0, 0)$ și punând $\varphi(Q) = (x_1, x_2, x_3, x_4)$, obținem că lungimea traiectoriei corespunzătoare lui γ este

$$\begin{aligned} |x_1| + |x_2| + |x_3| + |x_4| &= |x_1 - 0| + |x_2 - 0| + |x_3 - 0| + |x_4 - 0| \\ &= \delta((0, 0, 0, 0), (x_1, x_2, x_3, x_4)) = \delta(\varphi(P), \varphi(Q)) = \delta(P, Q). \end{aligned}$$

Numărul de simboluri barate care apar în γ este egal cu modulul $|s|$ al sumei s a componentelor negative ale vectorului (x_1, x_2, x_3, x_4) , iar numărul simbolurilor nebarate este egal cu suma componentelor pozitive. Prin permutarea între ele a simbolurilor barate și prin permutarea între ele a simbolurilor nebarate se obțin toate traiectoriile minimale care unesc punctele P și Q plecând de la secvența formală corespunzătoare uneia dintre ele. Deoarece, pentru fiecare secvență, există $|x_1|! |x_2|! |x_3|! |x_4|!$ permutări care o lasă neschimbată, numărul de traiectorii minimale care unesc P cu Q este

$$\begin{aligned} \frac{(-s)! s!}{|x_1|! |x_2|! |x_3|! |x_4|!} &= N((0, 0, 0, 0), (x_1, x_2, x_3, x_4)) \\ &= N(\varphi(P), \varphi(Q)) = N(P, Q). \end{aligned}$$

□

Un punct $Q \in \mathcal{M}$ (respectiv, $m \in \mathbb{M}$) este numit *vecin de ordinul k* al lui $P \in \mathcal{M}$ (respectiv, $x \in \mathbb{M}$) dacă $\delta(P, Q) = k$ (respectiv, $\delta(x, y) = k$). În cele ce urmează, vom identifica mulțimile \mathcal{M} și \mathbb{M} cu ajutorul unei hărți fixate.

Fiecare punct $x \in \mathbb{M}$ admite patru vecini de ordinul 1 (primii vecini), și anume

$$(11.9) \quad \begin{aligned} x^1 &= (x_1 + \chi(x), x_2, x_3, x_4) & x^2 &= (x_1, x_2 + \chi(x), x_3, x_4) \\ x^3 &= (x_1, x_2, x_3 + \chi(x), x_4) & x^4 &= (x_1, x_2, x_3, x_4 + \chi(x)) \end{aligned}$$

unde

$$(11.10) \quad \chi(x) = (-1)^{x_1+x_2+x_3+x_4}$$

și 12 vecini de ordinul 2

$$(11.11) \quad x^{jk} = (x^j)^k$$

unde $j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$, $j \neq k$. Se poate ușor observa că au loc relațiile

$$(11.12) \quad x^{jj} = x \qquad x^{jkl} = x^{lkj}$$

oricare ar fi $j, k, l \in \{1, 2, 3, 4\}$, $x \in \mathbb{M}$.

• În cazul multor cristale cu doi atomi în celula elementară (carbon-diamant, siliciu, germaniu, ZnS , $GaAs$, $InSb$, ZnO , etc.) [C01, C02, C03, C04] legăturile chimice interatomice corespund perechilor de atomi (x, y) care satisfac condiția $\delta(x, y) = 1$, ceea ce justifică importanța distanței δ .

11.4 Spații fibrante cu bază discretă. Secțiuni

Varietatea topologică discretă \mathcal{M} definită în secțiunea anterioară nu admite o structură de varietate diferențibilă, dar anumite obiecte matematice, similare dintr-un anumit punct de vedere unora utilizate în geometria diferențială pot fi definite folosind anumite idei din teoria diferențelor finite [Yam1, Yam2, Dim1, Dim2, Dim3, Dim4, Roe]. Ele sunt utile în descrierea matematică a fenomenelor fizice care au loc în interiorul cristalelor. Vom utiliza notațiile și terminologia din geometria diferențială [Kob2, Kob1, God, Hus] cu scopul de a indica corespondența cu cazul continuu. Evident, analogia are loc doar la nivel formal, noțiunile corespunzătoare din geometria diferențială nefiind cazuri limită pentru cele definite aici [C06, Man]. Vom identifica mulțimea \mathcal{M} cu \mathbb{M} utilizând o hartă fixată. O aplicație $c : \{0, 1, 2, \dots, k\} \rightarrow \mathbb{M} : j \mapsto c_j$ este numită *traietorie* în \mathbb{M} dacă $\delta(c_j, c_{j+1}) \leq 1$, oricare ar fi $j \in \{0, 1, 2, \dots, k-1\}$. În cazul $c_0 = c_k$, traietoria c este numită *traietorie închisă*. O traietorie c astfel încât $\delta(c_j, c_{j+1}) = 1$, oricare ar fi $j \in \{0, 1, 2, \dots, k-1\}$ se numește *traietorie nesingulară*.

Evident, orice traiectorie nesingulară $c : \{0, 1, 2, \dots, k\} \rightarrow \mathbb{M}$ cu proprietatea $c_0 = 0$ poate fi descrisă cu ajutorul unei secvențe

$$e_i, \bar{e}_i, e_{i_2}, \bar{e}_{i_2}, \dots, e'_{i_k} \in \mathcal{F}.$$

Vom nota cu $\mathcal{P}_k(y, x)$ mulțimea tuturor traiectoriilor $c : \{0, 1, 2, \dots, k\} \rightarrow \mathbb{M}$ cu $c_0 = y$ și $c_k = x$. O traiectorie $c \in \mathcal{P}_k(y, x)$ se numește *minimală* dacă

$$\text{Card} \{ j \in \{0, 1, \dots, k-1\} \mid c_j \neq c_{j+1} \} = \delta(y, x).$$

Numărul de traiectorii minimale aparținând mulțimii $\mathcal{P}_k(y, x)$ este $[C01, C02]$

$$N_k(y, x) = \frac{k!}{l!(k-l)!} \frac{\left(\sum_{x_j > y_j} (x_j - y_j)\right)! \left(\sum_{y_j > x_j} (y_j - x_j)\right)!}{\prod_{j=1}^4 |y_j - x_j|}$$

unde $l = \delta(y, x)$.

Definiția spațiului tangent la o varietate diferențiabilă într-un punct x ca spațiu al vectorilor tangenți la toate curbele trecând prin x sugerează posibilitatea de a asocia spațiul

$$T_x \mathbb{M} = \{ (x, x), (x, x^1), (x, x^2), (x, x^3), (x, x^4) \}$$

(care este o mulțime finită) fiecărui punct $x \in \mathbb{M}$. Fie $\mathcal{F}(\mathbb{M})$ algebra tuturor funcțiilor $f : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C}$. Urmând analogia cu geometria diferențială, se pot identifica elementele $(x, x), (x, x^1), (x, x^2), (x, x^3), (x, x^4)$ respectiv cu operatorii

$$0_x, (\partial/\partial x^1)_x, (\partial/\partial x^2)_x, (\partial/\partial x^3)_x, (\partial/\partial x^4)_x : \mathcal{F}(\mathbb{M}) \rightarrow \mathbb{C}$$

unde

$$(11.13) \quad 0_x f = 0 \quad (\partial/\partial x^j)_x f = \zeta_j^{-1} (f(x^j) - f(x))$$

și $\zeta_j \neq 0$ sunt constante reale. Oricare ar fi $f, g \in \mathcal{F}(\mathbb{M})$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, obținem

$$(\partial/\partial x^j)_x (\alpha f + \beta g) = \alpha (\partial/\partial x^j)_x f + \beta (\partial/\partial x^j)_x g$$

însă

$$(\partial/\partial x^j)_x (fg) = f(x^j) (\partial/\partial x^j)_x g + (\partial/\partial x^j)_x f g(x).$$

Tripletul $(T\mathbb{M}, \pi, \mathbb{M})$, unde

$$T\mathbb{M} = \bigcup_{x \in \mathbb{M}} T_x \mathbb{M} = \{ (x, y) \in \mathbb{M}^2 \mid \delta(x, y) \leq 1 \},$$

corespunde într-un anumit sens varietății tangente, și

$$\pi : T\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M}, \quad \pi(x, y) = x,$$

este un spațiu fibrat discret. Secțiunile corespunzătoare ale acestui fibrat

$$X : \mathbb{M} \rightarrow T\mathbb{M} : x \mapsto X_x, \quad \pi \circ X = I_{\mathbb{M}}$$

unde $I_{\mathbb{M}} : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M}$, $I_{\mathbb{M}}(x) = x$, sunt analogul discret al câmpurilor vectoriale. Fie

$$\mathcal{X}(\mathbb{M}) = \{ X : \mathbb{M} \rightarrow T\mathbb{M} : x \mapsto X_x \mid X_x \in T_x\mathbb{M} \}.$$

Dacă $F : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{M}$ este o aplicație astfel încât

$$\delta(F(x), F(y)) \leq \delta(x, y)$$

oricare ar fi $x, y \in \mathbb{M}$, atunci putem defini aplicațiile

$$(11.14) \quad F_* : T\mathbb{M} \rightarrow T\mathbb{M}, \quad F_*(x, y) = (F(x), F(y))$$

$$F_* : \mathcal{X}(\mathbb{M}) \rightarrow \mathcal{X}(\mathbb{M}) : X \mapsto F_*X, \quad (F_*X)_x = F_*(X_{F^{-1}(x)})$$

astfel încât diagrama

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{M} & \xrightarrow{X} & T\mathbb{M} \\ \downarrow F & & \downarrow F_* \\ \mathbb{M} & \xrightarrow{F_*X} & T\mathbb{M} \end{array}$$

să fie comutativă. În particular, dacă asociem aplicațiile $g_* : T\mathbb{M} \rightarrow T\mathbb{M}$ (resp. $g_* : \mathcal{X}(\mathbb{M}) \rightarrow \mathcal{X}(\mathbb{M})$) fiecărui element $g \in G$, atunci se obține o reprezentare a lui G în $T\mathbb{M}$ (respectiv $\mathcal{X}(\mathbb{M})$). În cazul acestor reprezentări, vom prefera să scriem g în loc de g_* .

Fiecare $X \in \mathcal{X}(\mathbb{M})$ definește o aplicație

$$(11.15) \quad X : \mathcal{F}(\mathbb{M}) \rightarrow \mathcal{F}(\mathbb{M}) : f \mapsto Xf \quad (Xf)(x) = X_x f.$$

Spunem că traiectoria $c : \{0, 1, 2, \dots, k\} \rightarrow \mathbb{M}$ este o soluție a ecuației definite de $X \in \mathcal{X}(\mathbb{M})$ dacă

$$X_{c_j} = (c_j, c_{j+1})$$

oricare ar fi $j \in \{0, 1, 2, \dots, k-1\}$.

Urmand în continuare analogia cu geometria diferențială, se poate defini spațiul vectorial

$$T_x^*\mathbb{M} = \{ \varphi : T_x\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C} \mid \varphi(x, x) = 0 \}$$

baza sa canonică

$$(11.16) \quad (dx^j)_x : T_x\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C} \quad \langle (dx^j)_x, (\partial/\partial x^k)_x \rangle = \delta_{jk}$$

și spațiul

$$T^*\mathbb{M} = \bigcup_{x \in \mathbb{M}} T_x^*\mathbb{M}$$

care este analogul varietății cotangente. Secțiunile spațiului fibrat $(T^*\mathbb{M}, \pi, \mathbb{M})$ corespund 1 formelor diferențiale. Fie

$$T^1(\mathbb{M}) = \{ \omega : \mathbb{M} \rightarrow T^*\mathbb{M} : x \mapsto \omega_x \mid \omega_x \in T_x^*\mathbb{M} \}.$$

Aplicația

$$(11.17) \mathcal{F}(\mathbb{M}) \times \mathcal{D}^1(\mathbb{M}) \longrightarrow \mathcal{D}^1(\mathbb{M}) : (f, \omega) \mapsto f\omega, \quad (f\omega)_x = f(x)\omega_x$$

definește o structură de $\mathcal{F}(\mathbb{M})$ -modul pe $\mathcal{D}^1(\mathbb{M})$.

Fiecare $\omega \in \mathcal{D}^1(\mathbb{M})$ se poate scrie sub forma $\omega = \sum_{j=1}^4 \omega_j dx^j$ unde $\omega_j \in \mathcal{F}(\mathbb{M})$ sunt funcțiile

$$\omega_j : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C}, \quad \omega_j(x) = \langle \omega_x, (\partial/\partial x^j)_x \rangle,$$

și ea definește o aplicație

$$(11.18) \omega : \mathcal{X}(\mathbb{M}) \longrightarrow \mathcal{F}(\mathbb{M}) : X \mapsto \omega(X), \quad (\omega(X))(x) = \langle \omega_x, X_x \rangle.$$

Dacă $f \in \mathcal{F}(\mathbb{M})$, atunci aplicația

$$df : \mathbb{M} \longrightarrow T^*\mathbb{M} : x \mapsto (df)_x, \quad \langle (df)_x, (\partial/\partial x^j)_x \rangle = (\partial/\partial x^j)_x f$$

corespunde *diferențialei totale* a lui f . Se poate observa că $df = 0$ dacă și numai dacă f este funcție constantă.

Spunem că $\omega \in \mathcal{D}^1(\mathbb{M})$ este o *1-formă exactă* dacă există $f \in \mathcal{F}(\mathbb{M})$ astfel încât $\omega = df$.

11.5 Integrale pe traiectorii discrete

Fie $\omega \in \mathcal{D}^1(\mathbb{M})$ o 1-formă și fie $c : \{0, 1, 2, \dots, k\} \longrightarrow \mathbb{M}$ o traiectorie. Numărul

$$(11.19) \quad \int_c \omega = \sum_{j=0}^{k-1} \zeta(c_j, c_{j+1}) \omega_{c_j}(c_j, c_{j+1})$$

unde

$$\zeta : T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \zeta(x, x) = 0, \quad \zeta(x, x^j) = \zeta_j,$$

reprezintă *integrala lui ω de-a lungul traiectoriei c* . În particular, oricare ar fi $f \in \mathcal{F}(\mathbb{M})$ avem

$$\int_c df = f(c_k) - f(c_0),$$

și se poate verifica că $\omega \in \mathcal{D}^1(\mathbb{M})$ este o 1-formă exactă dacă și numai dacă $\int_c \omega = 0$, oricare ar fi traiectoria închisă c .

Spațiul $\mathcal{F}(\mathbb{M})$ poate fi privit ca fiind spațiul secțiunilor fibratului trivial $(\mathbb{M} \times \mathbb{C}, \pi, \mathbb{M})$. Subspațiul său

$$l^2(\mathbb{M}) = \left\{ f : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{x \in \mathbb{M}} |f(x)|^2 < \infty \right\}$$

are o structură naturală de spațiu Hilbert definită de produsul scalar

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \sum_{x \in \mathbb{M}} f_1(x) \overline{f_2(x)},$$

iar formula

$$g : I^2(\mathbf{M}) \longrightarrow I^2(\mathbf{M}), \quad (gf)(x) = f(g^{-1}x)$$

definește o reprezentare unitară a lui G în $I^2(\mathbf{M})$.

Descrierea evoluției electronului în interiorul unui cristal este o problemă de mecanică cuantică foarte complicată. Toate modelele matematice care se ocupă de rezolvarea ei se bazează pe ample ipoteze simplificatoare. Noi vom accepta că timpul este discret, și în acord cu aproximația electronilor puternic legați [Kir], vom presupune că:

- singurele poziții posibile ale electronului sunt vecinătățile punctelor lui \mathbf{M} , și pentru a descrie starea electronului la un moment fixat este suficient să se indice amplitudinile de probabilitate de prezență a electronului pentru fiecare punct al lui \mathbf{M} . Spațiul tuturor stărilor posibile poate fi identificat cu mulțimea vectorilor unitari ai spațiului Hilbert $I^2(\mathbf{M})$;

- "deplasarea" electronului prin cristal se face "sărind" de la un atom la altul. În timpul unui interval elementar de timp electronul poate să rămână în vecinătatea aceluiași atom sau să treacă în vecinătatea unui atom vecin.

Aceste aproximații par a fi rezonabile. Compararea datelor experimentale cu o simulare numerică bazată pe modelul pe care-l prezentăm ar putea să le valideze sau să le infirme.

Traectoriile care unesc y cu x în k intervale elementare de timp corespund traectoriilor aparținând mulțimii $\mathcal{P}_k(y, x)$. Noi putem privi un cristal cu structura diamantului ca pe o rețea de ecrane sferice tangente având ca centre atomii cristalului, fiecare dintre ele cu patru orificii situate în punctele de tangență. Evoluția electronului în interiorul acestei rețele de ecrane poate fi descrisă ca în experiențele cu ecrane imaginare de Feynman [Fey] în elaborarea calculului cu amplitudini cuantice. Noi presupunem că există o 1-formă $S \in \mathcal{D}^1(\mathbf{M})$ astfel încât acțiunea pe traectoria c să fie $\int_c S$.

Pentru o descriere a evoluției electronului în contextul mecanicii cuantice în formularea bazată pe integralele pe traectorii, într-o primă aproximație se poate alege

$$(11.20) \quad K(x', k'; x, k) = C \sum_{c \in \mathcal{P}_{k'-k}(x, x')} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_c S \right]$$

(C este o constantă de normare) și considera că

$$P(x', k'; x, k) = |K(x', k'; x, k)|^2$$

este probabilitatea de a găsi electronul în vecinătatea lui x' la momentul k' știind că el s-a aflat în vecinătatea lui x la momentul k . Se poate observa că toate traectoriile $c \in \mathcal{P}_{k'-k}(x', x)$ contribuie la amplitudinea totală $K(x', k'; x, k)$, însă contribuțiile au faze diferite.

În cazul unui cristal situat într-un câmp uniform este natural să se presupună că există constantele $s_1, s_2, s_3, s_4 \in (0, \infty)$ astfel încât

$$(11.21) \quad S : \mathbf{M} \longrightarrow T^*\mathbf{M} : x \mapsto S_x, \quad S_j(x, x') = s_j$$

În acest caz particular, $\int_c S$ ia valoarea sa minimă $\sum_{j=1}^4 |x'_j - x_j| s_j$ când $c \in \mathcal{P}_{k'-k}(x', x)$ este o traiectorie minimală. Deoarece toți termenii corespunzători traiectoriilor minimale au aceeași fază, contribuția lor

$$(11.22) \quad N_{k'-k}(x', x) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^4 |x'_j - x_j| s_j \right]$$

la amplitudinea totală $K(x', k'; x, k)$ este importantă. Fazele termenilor care corespund traiectoriilor care nu sunt minimale fiind mai mari și diferite, părțile reale și imaginare ale acestor termeni oscilează între valori pozitive și negative. Aceasta face ca mare parte dintre contribuțiile lor să se anuleze reciproc.

11.6 Amplitudini de tranziție

Mecanica cuantică numită discretă a fost recent propusă de Gudder [Gud1, Gud2] și aplicațiile cunoscute se referă fie la \mathbb{Z}^n , fie la mulțini finite. În această secțiune vom prezenta o aplicație a acestui model la studiul cristalelor cu doi atomi în celula elementară.

Evoluția electronului în cristal sub forma unei succesiuni de salturi între atomi vecini sugerează ipoteza că impulsul electronului poate avea doar un număr finit de valori. Astfel, valorile impulsului electronului aflat în vecinătatea lui $x \in \mathbb{M}$ se află în corespondență cu vectorii spațiului $T_x \mathbb{M}$. Această ipoteză ne permite să identificăm spațiul

$$T\mathbb{M} = \bigcup_{x \in \mathbb{M}} \{ (x, x), (x, x^1), (x, x^2), (x, x^3), (x, x^4) \}$$

cu spațiul fazelor și să utilizăm formalismul general al mecanicii cuantice discrete [Gud1, Gud2] pentru descrierea evoluției electronului în cristal.

Noi descriem stările posibile ale electronului la un moment fixat cu ajutorul spațiului Hilbert $(l^2(T\mathbb{M}), \langle \cdot, \cdot \rangle)$, unde

$$(11.23) \quad l^2(T\mathbb{M}) = \left\{ \psi : T\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{q \in T\mathbb{M}} |\psi(q)|^2 < \infty \right\}$$

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \sum_{q \in T\mathbb{M}} \psi_1(q) \overline{\psi_2(q)}.$$

Formula

$$(11.24) \quad g : l^2(T\mathbb{M}) \rightarrow l^2(T\mathbb{M}), \quad (g\psi)(q) = \psi(g^{-1}q)$$

definește o reprezentare unitară a lui G în $l^2(T\mathbb{M})$.

Pentru $q = (x, y)$, $q' = (x', y') \in T\mathbb{M}$, definim $\delta(q, q') = \delta(x, x')$. O k -traiectorie în $T\mathbb{M}$ este o aplicație

$$\gamma : \{0, 1, 2, \dots, k\} \rightarrow T\mathbb{M} : j \mapsto \gamma_j$$

astfel încât $\delta(\gamma_j, \gamma_{j+1}) \leq 1$, oricare ar fi $j \in \{0, 1, 2, \dots, k-1\}$. Fie $P_k(q, q')$ mulțimea tuturor k -trajectoriilor γ cu proprietatea că $\gamma_0 = q$ și $\gamma_k = q'$.

Fiecare k -trajectorie $\gamma \in P_k(q, q')$ poate fi privită ca o trajectorie în spațiul fazelor TIM a electronului care trece din starea q în starea q' în k intervale elementare de timp. Funcția $A : TIM \times TIM \rightarrow \mathbb{C}$ se numește¹ *amplitudine de tranziție dintr-un salt* [Gud1, Gud2] dacă $A(q, q') = 0$ în cazul $\delta(q, q') > 1$, și dacă

$$(11.25) \quad \sum_{q \in TIM} A(q_1, q) \overline{A(q_2, q)} = \sum_{q \in TIM} A(q, q_1) \overline{A(q, q_2)} = \delta_{q_1, q_2}.$$

oricare ar fi $q_1, q_2 \in TIM$.

Teorema 11.6.1 Funcția $A : TIM \times TIM \rightarrow \mathbb{C}$ definită prin

$$(11.26) \quad \begin{aligned} A((x, x), (x, x)) &= 1, \\ A\left(\begin{pmatrix} x \\ x^j \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x^j \\ x \end{pmatrix}\right) &= \alpha, \\ A\left(\begin{pmatrix} x \\ x^j \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x^j \\ x^{jk} \end{pmatrix}\right) &= \beta e^{i\theta} \quad \text{dacă } k \neq j, \\ A((x, y), (x', y')) &= 0 \quad \text{în alte cazuri} \end{aligned}$$

unde $\alpha, \beta \in (0, \infty)$, $\theta \in [0, 2\pi)$, este o amplitudine de tranziție dintr-un salt dacă și numai dacă condițiile următoare sunt verificate

$$(11.27) \quad \begin{aligned} 1) \quad & \alpha^2 + 3\beta^2 = 1 \\ 2) \quad & \alpha \cos \theta + \beta = 0. \end{aligned}$$

Demonstrație: Într-adevăr, pentru $q_1 = q_2 = (x, x^j)$, obținem

$$\sum_{q \in TIM} A(q_1, q) \overline{A(q_2, q)} = \sum_{k=1}^4 |A((x, x^j), (x^j, x^{jk}))|^2 = \alpha^2 + 3\beta^2,$$

$$\begin{aligned} \sum_{q \in TIM} A(q, q_1) \overline{A(q, q_2)} &= \sum_{k=1}^4 |A((x^k, x), (x, x^j))|^2 \\ &= \sum_{k=1}^4 |A((x^k, x^{kk}), (x^{kk}, x^{kkj}))|^2 = \alpha^2 + 3\beta^2. \end{aligned}$$

Cu excepția cazului $q_1 = (x, x^j)$, $q_2 = (x^{jk}, x^j)$, $j \neq k$ când

$$\begin{aligned} \sum_{q \in TIM} A(q_1, q) \overline{A(q_2, q)} &= \sum_{l=1}^4 A((x, x^j), (x^j, x^{jl})) \overline{A((x^{jk}, x^j), (x^j, x^{jl}))} \\ &= 2\alpha\beta \cos \theta + 2\beta^2 \end{aligned}$$

și a cazului $q_1 = (x, x^j)$, $q_2 = (x, x^k)$, $j \neq k$ când

$$\sum_{q \in TIM} A(q, q_1) \overline{A(q, q_2)} = \sum_{l=1}^4 A((x^l, x), (x, x^j)) \overline{A((x^l, x), (x, x^k))}$$

¹ one-step transition amplitude în engleză

$$= 2\alpha\beta \cos \theta + 2\beta^2$$

în toate celelalte cazuri condiția (11.25) este verificată oricare ar fi α , β , θ .

□

Teorema 11.6.2 Amplitudinea de tranziție dintr-un salt $A : T\mathbb{M} \times T\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C}$ definită prin (11.26) și (11.27) este G -invariantă.

Demonstrație: Conform relației (11.26) avem

$$A(\Phi_j(q), \Phi_j(q')) = A(q, q'), \quad A(\Phi_\sigma(q), \Phi_\sigma(q')) = A(q, q')$$

oricare ar fi $(q, q') \in T\mathbb{M} \times T\mathbb{M}$, $\sigma \in \Sigma$, et $j \in \{1, 2, 3, 4\}$. □

Pentru $\gamma \in P_k(q, q')$, amplitudinea [Gud1, Gud2] lui γ este

$$(11.28) \quad A(\gamma) = A(q, \gamma_1) A(\gamma_1, \gamma_2) \dots A(\gamma_{k-1}, q').$$

Pentru $q_0, q \in T\mathbb{M}$, amplitudinea de tranziție din k salturi² [Gud1, Gud2] de la q_0 la q este

$$(11.29) \quad A_k(q_0, q) = \sum_{\gamma \in P_k(q_0, q)} A(\gamma)$$

cu convenția $A_0(q_0, q) = 1$ pentru $q_0 = q$, și $A_0(q_0, q) = 0$ pentru $q_0 \neq q$.

Rezultatele generale conținute în teoremele 11.6.3 -11.6.5 și ale căror demonstrații pot fi găsite în [Gud1, Gud2] ne permit să definim câteva noțiuni utile.

Teorema 11.6.3 a) Oricare ar fi $k \in \mathbb{N}$ are loc relația

$$(11.30) \quad \sum_{q \in T\mathbb{M}} |A_k(q_0, q)|^2 = \sum_{q \in T\mathbb{M}} |A_k(q, q_0)|^2 = 1$$

b) Dacă $j, k \in \mathbb{N}$, $j \leq k$, atunci

$$(11.31) \quad A_k(q_0, q) = \sum_{q' \in T\mathbb{M}} A_j(q_0, q') A_{k-j}(q', q).$$

Acest rezultat arată că $A_k(q_0, \cdot)$, $A_k(\cdot, q_0) \in l^2(T\mathbb{M})$, și ne permite să interpretăm $|A_k(q_0, q)|^2$ ca fiind la probabilitatea de tranziție din k salturi³ [Gud1, Gud2] de la q_0 la q .

Pentru a simplifica notațiile vom scrie $(x, 0)$, $(x, 1)$, $(x, 2)$, $(x, 3)$, $(x, 4)$ în loc de (x, x) , (x, x^1) , (x, x^2) , (x, x^3) , (x, x^4) , respectiv. Deoarece în cazul amplitudinii de tranziție dintr-un salt considerată mai sus

$$A_k((x, 0), (x', n)) = \begin{cases} 1 & \text{daca } (x', n) = (x, 0) \\ 0 & \text{daca } (x', n) \neq (x, 0) \end{cases}$$

²*k-step transition amplitude* în engleză

³*k-step probability* în engleză

rămâne să mai determinăm $A_k((x, m), (x', n))$ doar pentru $m, n \in \{1, 2, 3, 4\}$. Aceasta este o problemă destul de complicată. Dacă însă suntem interesați doar de direcția de mișcare [Mar] problema devine mult mai accesibilă. Punând $o = (0, 0, 0, 0)$,

$$(11.32) \quad A_k(j, j') = \sum_{x \in \mathbb{M}} A_k((o, j), (x, j'))$$

$$(11.33) \quad M = (M_{jj'}) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} \\ \beta e^{i\theta} & \alpha & \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} \\ \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} & \alpha & \beta e^{i\theta} \\ \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} & \beta e^{i\theta} & \alpha \end{pmatrix}$$

obținem

$$(11.34) \quad A_k(j, j') = \sum_{i_1, \dots, i_{k-1}=1}^4 M_{ji_1} M_{i_1 i_2} \dots M_{i_{k-1} j'} = (M^k)_{jj'}$$

Într-adevăr,

$$A_1(j, j') = A((o, j), (o^j, j')) = M_{jj'}$$

$$A_2(j, j') = \sum_{i_1=1}^4 A((o, j), (o^j, i_1)) A((o^j, i_1), (o^{j i_1}, j')) = \sum_{i_1=1}^4 M_{ji_1} M_{i_1 j'}$$

etc. Deoarece

$$M^k = \left\{ (\alpha - \beta e^{i\theta}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta e^{i\theta} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \right\}^k =$$

$$(\alpha - \beta e^{i\theta})^k \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \sum_{n=1}^k \frac{k!}{n! (k-n)!} (\alpha - \beta e^{i\theta})^{k-n} (4\beta e^{i\theta})^n \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

rezultă

$$(11.35) \quad A_k(j, j) = ((\alpha - \beta e^{i\theta}) + 4\beta e^{i\theta})^k = (\alpha + 3\beta e^{i\theta})^k$$

și

$$(11.36) \quad A_k(j, j') = (\alpha + 3\beta e^{i\theta})^k - (\alpha - \beta e^{i\theta})^k$$

pentru $j \neq j'$.

Putem interpreta $A_k(j, j')$ ca fiind amplitudinea de probabilitate ca electronul să se deplaseze în direcția j' la momentul k știind că el se deplasa în direcția j la momentul inițial.

Mulțimea $\{ \delta_q : T\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{Q} \mid \delta_q(q') = \delta_{qq'} \}$ este o bază ortonormată a lui $l^2(T\mathbb{M})$, și $\psi(q) = \langle \psi, \delta_q \rangle$ oricare ar fi $\psi \in l^2(T\mathbb{M})$, $q \in T\mathbb{M}$.

Teorema 11.6.4 Operatorii $[Gud1, Gud2]$

$$(11.37) \quad T : l^2(T\mathbb{M}) \longrightarrow l^2(T\mathbb{M}), \quad (T\psi)(q) = \sum_{q' \in T\mathbb{M}} A(q, q') \psi(q')$$

$$(11.38) \quad U : l^2(T\mathbb{M}) \longrightarrow l^2(T\mathbb{M}), \quad (U\psi)(q) = \sum_{q' \in T\mathbb{M}} \overline{A(q', q)} \psi(q')$$

sunt operatori unitari și $U = T^*$.

Operatorii T și U se numesc *propagatori*. Relația $A(q_0, q) = \langle T\delta_q, \delta_{q_0} \rangle$ ne permite să interpretăm $A(q_0, q)$ ca fiind amplitudinea de tranziție de la δ_{q_0} la $T\delta_q$.

Teorema 11.6.5 Dacă $\psi \in l^2(T\mathbb{M})$, $q_0 \in T\mathbb{M}$ atunci

$$(11.39) \quad T^k \psi(q_0) = \sum_{q \in T\mathbb{M}} \psi(q) A_k(q_0, q).$$

Acest rezultat arată că oricare ar fi $\psi : T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{R}$, $\psi \in l^2(T\mathbb{M})$, putem defini amplitudinea de probabilitate de tranziție din k salturi $[Gud1, Gud2]$

$$(11.40) \quad A_k(\psi|q_0) = \sum_{q \in T\mathbb{M}} \psi(q) A_k(q_0, q)$$

și probabilitatea de tranziție din k salturi $[Gud1, Gud2]$

$$(11.41) \quad E_k(\psi|q_0) = \sum_{q \in T\mathbb{M}} \psi(q) |A_k(q_0, q)|^2$$

cu condiția ca seria să fie convergentă.

Plecând de la amplitudinea de tranziție dintr-un salt $A : T\mathbb{M} \times T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C}$ și de la o funcție $v : T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{R}$, se poate defini amplitudinea de tranziție dintr-un salt

$$(11.42) \quad A^v : T\mathbb{M} \times T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C} \quad A^v(q, q') = e^{-iv(q)} A(q, q').$$

Putem privi $A^v : T\mathbb{M} \times T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C}$ ca fiind amplitudinea de tranziție dintr-un salt corespunzătoare sistemului cuantic considerat la care s-a adăugat un câmp exterior a cărui influență este descrisă cu ajutorul energiei potențiale $v : T\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{R}$. În particular, dacă $\gamma \in P_k(q_0, q)$, atunci

$$A^v(\gamma) = A(\gamma) \exp \left[-i \sum_{j=0}^{k-1} v(\gamma_j) \right],$$

amplitudinea de tranziție din k salturi este dată de formula

$$A_k^v(q_0, q) = \sum_{\gamma \in P_k(q_0, q)} A(\gamma) \exp \left[-i \sum_{j=0}^{k-1} v(\gamma_j) \right],$$

și propagatorul corespunzător este

$$T_v : l^2(T\mathbb{M}) \longrightarrow l^2(T\mathbb{M}) \quad (T_v \psi)(q) = e^{-iv(q)} T\psi(q).$$

Capitolul 12

Cristale cu structura diamantului

12.1 Structura diamantului

Printre cristalele cu doi atomi în celula elementară se află clasa cristalelor cu structura diamantului. Grupul lor de simetrie este grupul spațial $O_h^7 \equiv Fd\bar{3}m$.

Reprezentarea uzuală în \mathbb{E}_3 a grupului complet al tetraedrului

$$T_d = \bar{4}3m = \langle a, b \mid a^4, b^2, (ab)^3 \rangle$$

definită prin relațiile

$$a(x, y, z) = (-y, x, -z) \quad b(x, y, z) = (x, -z, -y)$$

este [Str]

$\epsilon(x, y, z) = (x, y, z)$	$\rho_{yz}(x, y, z) = (x, -z, -y)$
$\delta_{2x}(x, y, z) = (x, -y, -z)$	$\rho_{yx}(x, y, z) = (x, z, y)$
$\delta_{2y}(x, y, z) = (-x, y, -z)$	$\rho_{zx}(x, y, z) = (-z, y, -x)$
$\delta_{2z}(x, y, z) = (-x, -y, z)$	$\rho_{x\bar{y}}(x, y, z) = (z, y, x)$
$\sigma_{4x}(x, y, z) = (-x, z, -y)$	$\delta_{3xyz}(x, y, z) = (z, x, y)$
$\sigma_{4x}^{-1}(x, y, z) = (-x, -z, y)$	$\delta_{3x\bar{y}z}^{-1}(x, y, z) = (y, z, x)$
$\sigma_{4y}(x, y, z) = (-z, -y, x)$	$\delta_{3x\bar{y}\bar{x}}(x, y, z) = (-z, -x, y)$
$\sigma_{4y}^{-1}(x, y, z) = (z, -y, -x)$	$\delta_{3x\bar{y}\bar{x}}^{-1}(x, y, z) = (-y, z, -x)$
$\sigma_{4z}(x, y, z) = (y, -x, -z)$	$\delta_{3\bar{x}y\bar{x}}(x, y, z) = (z, -x, -y)$
$\sigma_{4z}^{-1}(x, y, z) = (-y, x, -z)$	$\delta_{3\bar{x}y\bar{x}}^{-1}(x, y, z) = (-y, -z, x)$
$\rho_{xy}(x, y, z) = (-y, -x, z)$	$\delta_{3\bar{x}\bar{y}z}(x, y, z) = (-z, x, -y)$
$\rho_{x\bar{y}}(x, y, z) = (y, x, z)$	$\delta_{3\bar{x}\bar{y}z}^{-1}(x, y, z) = (y, -z, -x)$

Definind

$$i(x, y, z) = (-x, -y, -z)$$

se obține reprezentarea uzuală a grupului complet al octaedrelui

$$O_h \equiv m\bar{3}m = T_d \cup \{ i \circ g \mid g \in T_d \}$$

care este grupul punctual al cristalelor cu structura diamantului.

Fie $t_1 = (0, 2, 2)$, $t_2 = (2, 0, 2)$, $t_3 = (2, 2, 0)$. Grupul O_h^7 se poate defini prin relația

$$(12.1) O_h^7 = \{ (R, a) \mid R \in T_d, a \in T \} \cup \{ (i \circ R, e_4 + a) \mid R \in T_d, a \in T \}$$

unde T este grupul de translații

$$T = \{ (\epsilon, n_1 t_1 + n_2 t_2 + n_3 t_3) \mid n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \}.$$

În paragraful 8.4 am obținut un model matematic pentru cristalele cu structura diamantului prin metoda proiecției benzii plecând de la T_d -sistemul de puncte $T_d(-1/2, 1/2, 1/2)$. Plecând de la reprezentarea lui T_d în \mathbb{E}_4 definită de acest sistem de puncte

$$\begin{array}{ll} \epsilon(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_2, x_3, x_4) & \rho_{yz}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_2, x_3, x_1) \\ \delta_{2x}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_3, x_2, x_1) & \rho_{y\bar{x}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_3, x_2, x_4) \\ \delta_{2y}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_4, x_1, x_2) & \rho_{zx}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_4, x_3, x_2) \\ \delta_{2z}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_1, x_4, x_3) & \rho_{z\bar{y}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_2, x_1, x_4) \\ \sigma_{4x}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_4, x_1, x_3) & \delta_{3xyz}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_1, x_2, x_4) \\ \sigma_{4x}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_1, x_4, x_2) & \delta_{3xy\bar{z}}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_3, x_1, x_4) \\ \sigma_{4y}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_3, x_4, x_1) & \delta_{3x\bar{y}z}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_3, x_4, x_2) \\ \sigma_{4y}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_1, x_2, x_3) & \delta_{3xy\bar{z}}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_4, x_2, x_3) \\ \sigma_{4z}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_3, x_1, x_2) & \delta_{3\bar{x}yz}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_2, x_1, x_3) \\ \sigma_{4z}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_4, x_2, x_1) & \delta_{3\bar{x}\bar{y}z}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_2, x_4, x_1) \\ \rho_{xy}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1, x_2, x_4, x_3) & \delta_{3\bar{x}\bar{y}\bar{z}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_4, x_3, x_1) \\ \rho_{x\bar{y}}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_2, x_1, x_3, x_4) & \delta_{3\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{-1}(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_1, x_3, x_2) \end{array}$$

se obține descompunerea $\mathbb{E}_4 = \mathbb{E}_4^{\parallel} \oplus \mathbb{E}_4^{\perp}$ unde

$$\mathbb{E}_4^{\parallel} = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{E}_4 \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0\}$$

$$\mathbb{E}_4^{\perp} = \{(x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{E}_4 \mid x_1 = x_2 = x_3 = x_4\}.$$

Utilizând metoda proiecției benzii și fereastra de selecție

$$\Omega = \{(\alpha, \alpha, \alpha, \alpha) \mid -1/4 < \alpha \leq 1/4\}$$

obținem modelul

$$(12.2) \quad \mathbb{M}^{\parallel} = \{ \pi^{\parallel} x \mid x \in \mathbb{Z}^4, \pi^{\perp} x \in \Omega \}$$

unde

$$\pi^{\parallel} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \quad \pi^{\perp} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Teorema 12.1.1 *Reprezentarea lui T_4 în \mathbb{E}_4 poate fi prelungită la o reprezentare a lui O_h^7 în \mathbb{E}_4 punând*

$$(12.3) \quad (i, e_4)(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1, -x_2, -x_3, -x_4 + 1).$$

Demonstrație: Afirmția decurge direct din descrierea (11.2) a grupului O_h^7 cu ajutorul generatorilor și a relațiilor alegând $a = \sigma_{4i}^{-1}$, $b = \rho_{ij}$, $t = (i, e_4)$.

□

Mulțimea \mathbb{M}^\sharp care are structura diamantului este proiecția mulțimii

$$(12.4) \quad \mathbb{M} = \{ x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{Z}^4 \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \in \{0; 1\} \}$$

adică,

$$\mathbb{M}^\sharp = \pi^\sharp(\mathbb{M}).$$

Deoarece aplicația

$$\mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{M}^\sharp : x \mapsto x^\sharp x$$

este o bijecție, mulțimea \mathbb{M} poate de asemenea să fie utilizată ca model matematic pentru cristalele cu structura diamantului.

Teorema 12.1.2 *Mulțimea*

$$(12.5) \quad \mathbb{M} = \{ x = (x_1, x_2, x_3, x_4) \in \mathbb{Z}^4 \mid x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \in \{0; 1\} \}$$

este o mulțime O_h^7 -invariantă.

Demonstrație: Într-adevăr, mulțimea \mathbb{M} este invariantă în raport cu transformările

$$a(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_3, x_4, x_2, x_1)$$

$$b(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_4, x_2, x_3, x_1)$$

$$(i, e_4)(x_1, x_2, x_3, x_4) = (-x_1, -x_2, -x_3, -x_4 + 1).$$

care corespund generatorilor lui O_h^7 .

□

Restricțiile la \mathbb{M}

$$a : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{M} : (x_1, x_2, x_3, x_4) \mapsto (x_3, x_4, x_2, x_1)$$

$$b : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{M} : (x_1, x_2, x_3, x_4) \mapsto (x_4, x_2, x_3, x_1)$$

$$(i, e_4) : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{M} : (x_1, x_2, x_3, x_4) \mapsto (-x_1, -x_2, -x_3, -x_4 + 1)$$

ale transformărilor a , b , (i, e_4) generează o reprezentare exactă a lui O_h^7 ca grup de permutări ale mulțimii \mathbb{M} , grup care va fi notat de asemenea cu O_h^7 , adică,

$$(12.6) \quad O_h^7 = \{ g_1 \circ g_2 \circ \dots \circ g_n \mid n \in \mathbb{N}, g_1, g_2, \dots, g_n \in \{a, b, (i, e_4)\} \}.$$

Aplicația

$$(12.7) \quad \delta : \mathbb{M} \times \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{N} \quad \delta(x, y) = \sum_{j=1}^4 |x_j - y_j|$$

este o distanță O_h^7 -invariantă pe \mathbb{M} . Fiecare punct $x \in \mathbb{M}$ are patru vecini de ordinul 1

$$(12.8) \quad \begin{aligned} x^1 &= (x_1 + \chi(x), x_2, x_3, x_4) & x^2 &= (x_1, x_2 + \chi(x), x_3, x_4) \\ x^3 &= (x_1, x_2, x_3 + \chi(x), x_4) & x^4 &= (x_1, x_2, x_3, x_4 + \chi(x)) \end{aligned}$$

unde

$$(12.9) \quad \chi(x) = (-1)^{x_1+x_2+x_3+x_4}$$

și 12 vecini de ordinul 2

$$(12.10) \quad x^{jk} = (x^j)^k$$

unde $j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$, $j \neq k$.

Utilizarea mulțimii \mathbb{M} ca model matematic pentru cristalele cu structura diamantului simplifică mult formalismul matematic al anumitor modele clasice și oferă o bază matematică pentru noi modele. Această descriere ne permite să definim cu ușurință obiecte matematice O_h^7 -invariante. Expresiile lor matematice în descrierea uzuală sunt, în general, mult mai complicate. De exemplu, dacă se utilizează modelul uzual al structurii diamantului $\mathbb{D} = \mathbb{D}_0 \cup \mathbb{D}_1$, unde

$$\mathbb{D}_0 = \{ (x, y, z) \in \mathbb{Z}^3 \mid 4|(-x + y + z), 4|(x - y + z), 4|(x + y - z) \}$$

$$\mathbb{D}_1 = \{ (x, y, z) \in \mathbb{Z}^3 \mid 4|(-x + y + z + 1), 4|(x - y + z + 1), 4|(x + y - z + 1) \}$$

atunci definiția distanței δ devine

$$\delta((x, y, z), (x', y', z')) =$$

$$\left\{ \begin{aligned} & (|-x - y - z + x' + y' + z'| \\ & + |-x + y + z + x' - y' - z'| \\ & + |x - y + z - x' + y' - z'| \\ & + |x + y - z - x' - y' + z'|) / 4 \quad \text{dacă} \quad ((x, y, z), (x', y', z')) \in \mathbb{D}_0 \times \mathbb{D}_0 \\ & \text{sau } ((x, y, z), (x', y', z')) \in \mathbb{D}_1 \times \mathbb{D}_1 \\ \\ & (|-x - y - z + x' + y' + z' - 1| \\ & + |-x + y + z + x' - y' - z' - 1| \\ & + |x - y + z - x' + y' - z' - 1| \\ & + |x + y - z - x' - y' + z' - 1|) / 4 \quad \text{dacă} \quad ((x, y, z), (x', y', z')) \in \mathbb{D}_0 \times \mathbb{D}_1 \\ \\ & (|-x - y - z + 1 + x' + y' + z'| \\ & + |-x + y + z + 1 + x' - y' - z'| \\ & + |x - y + z + 1 - x' + y' - z'| \\ & + |x + y - z + 1 - x' - y' + z'|) / 4 \quad \text{dacă} \quad ((x, y, z), (x', y', z')) \in \mathbb{D}_1 \times \mathbb{D}_0 \end{aligned} \right.$$

12.2 Nivele de energie

Spațiul

$$l^2(\mathbb{M}) = \left\{ \psi : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{x \in \mathbb{M}} |\psi(x)|^2 \text{ este sumabila} \right\}$$

înzestrat cu produsul scalar

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \sum_{x \in \mathbb{M}} \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)}$$

este un spațiu Hilbert izomorf cu spațiul bine-cunoscut l^2 .

Teorema 12.2.1 *Relația*

$$(T_g \psi)(x) = \psi(g^{-1}(x))$$

definiște o reprezentare unitară a grupului O_h^7 în $l^2(\mathbb{M})$.

Demonstrație: Într-adevăr,

$$\begin{aligned} ((T_g \circ T_h)\psi)(x) &= (T_g(T_h \psi))(x) = (T_h \psi)(g^{-1}(x)) \\ &= \psi(h^{-1}(g^{-1}(x))) = \psi((g \circ h)^{-1}(x)) = (T_{g \circ h}\psi)(x) \end{aligned}$$

oricare ar fi $x \in \mathbb{M}$, $g, h \in O_h^7$, și

$$\langle T_g \psi_1, T_g \psi_2 \rangle = \sum_{x \in \mathbb{M}} (T_g \psi_1)(x) \overline{(T_g \psi_2)(x)}$$

$$\sum_{x \in \mathbb{M}} \psi_1(g^{-1}(x)) \overline{\psi_2(g^{-1}(x))} = \sum_{x \in \mathbb{M}} \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle$$

oricare ar fi $g \in O_h^7$, $\psi_1, \psi_2 \in l^2(\mathbb{M})$. □

Anumite date experimentale privind evoluția electronului în interiorul cristalelor cu structura diamantului, cum ar fi existența benzilor de energie, pot fi explicate din punct de vedere teoretic utilizând aproximația electronilor puternic legați, adică presupunând că singurele poziții pe care le poate ocupa electronul sunt vecinătățile nucleelor atomilor cristalului. Notând cu $|x\rangle$ funcția de undă corespunzătoare electronului situat în vecinătatea nucleului atomului x , funcția de undă cea mai generală care descrie sistemul cuantic considerat este o suprapunere liniară

$$\sum_{x \in \mathbb{M}} \psi(x) |x\rangle$$

unde $\psi \in l^2(\mathbb{M})$.

Teorema 12.2.2 *Operatorul liniar*

$$(12.11) \quad H : l^2(\mathbb{M}) \longrightarrow l^2(\mathbb{M}) \quad (H\psi)(x) = \alpha \psi(x) + \beta \sum_{j=1}^4 \psi(x^j)$$

unde α și β sunt două constante reale, este un operator liniar auto-adjunct O_h^7 -invariant definit pe întreg spațiul $l^2(\mathbb{M})$.

Demonstrație: Deoarece [Wei]

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \mathbb{M}} |(H\psi)(x)|^2 &= \sum_{x \in \mathbb{M}} \left| \alpha \psi(x) + \beta \sum_{j=1}^4 \psi(x^j) \right|^2 \\ &\leq (\alpha^2 + 4\beta^2) \left[\sum_{x \in \mathbb{M}} |\psi(x)|^2 + \sum_{j=1}^4 \sum_{x \in \mathbb{M}} |\psi(x^j)|^2 \right] = 5(\alpha^2 + 4\beta^2) \sum_{x \in \mathbb{M}} |\psi(x)|^2 \end{aligned}$$

rezultă că H este definit pe întreg spațiul $l^2(\mathbb{M})$. El este un operator autoadjunct [Cyc]

$$\begin{aligned} \langle H\psi_1, \psi_2 \rangle &= \sum_{x \in \mathbb{M}} \left[\alpha \psi_1(x) + \beta \sum_{j=1}^4 \psi_1(x^j) \right] \overline{\psi_2(x)} \\ &= \sum_{x \in \mathbb{M}} \alpha \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} + \beta \sum_{j=1}^4 \sum_{x \in \mathbb{M}} \psi_1(x^j) \overline{\psi_2(x)} \\ &= \sum_{x \in \mathbb{M}} \alpha \psi_1(x) \overline{\psi_2(x)} + \beta \sum_{j=1}^4 \sum_{x \in \mathbb{M}} \psi_1(x) \overline{\psi_2(x^j)} = \langle \psi_1, H\psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

□

Căutând (într-o extensie a spațiului $l^2(\mathbb{M})$) funcții proprii ale lui H de forma

$$\psi_k : \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{C} \quad \psi_k(x) = \begin{cases} C_1 \exp\left(i \sum_{j=1}^4 k_j x_j\right) & \text{daca } \sum_{j=1}^4 x_j = 0 \\ C_2 \exp\left(i \sum_{j=1}^4 k_j x_j\right) & \text{daca } \sum_{j=1}^4 x_j = 1 \end{cases}$$

unde $k = (k_0, k_1, k_2, k_3) \in \mathbb{B}_4^{\parallel}$, $C_1, C_2 \in \mathbb{C}$ sunt constante, relația

$$H\psi_k = E_k \psi_k$$

este echivalentă cu sistemul de ecuații

$$\alpha C_1 + \beta C_2 \sum_{j=1}^4 \exp(i k_j) = E_k C_1$$

$$\alpha C_2 + \beta C_1 \sum_{j=1}^4 \exp(-i k_j) = E_k C_2.$$

Rezultă că soluțiile

$$(12.12) \quad E_k = \alpha \pm \beta \left| \sum_{j=1}^4 \exp(i k_j) \right|$$

ale ecuației

$$\begin{vmatrix} \alpha - E_k & \beta \sum_{j=1}^4 \exp(i k_j) \\ \beta \sum_{j=1}^4 \exp(-i k_j) & \alpha - E_k \end{vmatrix} = 0$$

aparțin spectrului operatorului H , oricare ar fi $k \in \mathbb{E}_4^{\parallel}$.

În particular, dacă $k \in \mathbb{E}_4^{\parallel}$ satisface relația

$$\sum_{j=1}^4 \sin k_j = 0$$

atunci

$$(12.13) \quad E_k = \alpha \pm \beta \sum_{j=1}^4 \cos k_j$$

aparține spectrului lui H . Aceste rezultate sunt în acord cu existența benzilor de energie în cazul electronului aflat în interiorul cristalului [Kir, C03, C04].

12.3 Spectrul fononic

Pentru a descrie micile oscilații ale atomilor cristalului în raport cu pozițiile lor de echilibru vom identifica spațiul fizic \mathbb{E}_3 cu spațiul

$$\mathbb{E}_4^{\parallel} = \{X = (X_1, X_2, X_3, X_4) \in \mathbb{E}_4 \mid X_1 + X_2 + X_3 + X_4 = 0\}$$

cu ajutorul izomorfismului

$$\mathbb{E}_3 \longrightarrow \mathbb{E}_4^{\parallel} : r \mapsto (\langle r, e_1/\sqrt{3} \rangle, \langle r, e_2/\sqrt{3} \rangle, \langle r, e_3/\sqrt{3} \rangle, \langle r, e_4/\sqrt{3} \rangle)$$

care asociază fiecărui vector $r \in \mathbb{E}_3$ proiecțiile sale pe e_1, e_2, e_3, e_4 .

Vom descrie evoluția atomilor cristalului în raport cu pozițiile lor de echilibru cu ajutorul unei funcții

$$X : \mathbb{R} \times \mathbb{M} \longrightarrow \mathbb{E}_4^{\parallel} : (t, x) \mapsto (X_1(t, x), X_2(t, x), X_3(t, x), X_4(t, x))$$

unde $X_j(t, x)$ este proiecția pe dreapta corespunzătoare lui e_j a segmentului orientat având ca origine poziția de echilibru a atomului $x \in \mathbb{M}$ și ca extremitate poziția acestui atom la momentul t .

Teorema 12.3.1 *Relațiile*

$$a(X_1, X_2, X_3, X_4) = (X_3, X_4, X_2, X_1)$$

$$b(X_1, X_2, X_3, X_4) = (X_4, X_2, X_3, X_1)$$

$$(i, e_4)(X_1, X_2, X_3, X_4) = (-X_1, -X_2, -X_3, -X_4).$$

definesc o reprezentare liniară a grupului O_h^7 în \mathbb{R}_4^{\parallel} .

Demonstrație: Afirmția decurge imediat din descrierea (11.2) a grupului O_h^7 cu ajutorul generatorilor și a relațiilor. \square

Teorema 12.3.2 *Dacă $m \in (0, \infty)$ și $\phi_{jn}^p, \phi_{jn}^{pq}$ sunt constante reale astfel încât*

$$(12.14) \quad \phi_{jn}^p = \phi_{\sigma(j)\sigma(n)}^{\sigma(p)} \quad \phi_{jn}^{pq} = \phi_{\sigma(j)\sigma(n)}^{\sigma(p)\sigma(q)}$$

oricare ar fi $j, n, p, q \in \{1, 2, 3, 4\}$, $p \neq q$, $\sigma \in S_4$, atunci sistemul de ecuații

$$(12.15) \quad m \frac{d^2}{dt^2} X_j(t, x) = \sum_{p=1}^4 \sum_{n=1}^4 \phi_{jn}^p [X_n(t, x^p) - X_n(t, x)] \\ + \sum_{p \neq q}^4 \sum_{n=1}^4 \phi_{jn}^{pq} [X_n(t, x^{pq}) - X_n(t, x)]$$

este O_h^7 -invariant.

Demonstrație: Sistemul considerat este invariant în raport cu transformările corespunzătoare generatorilor $a, b, (i, e_4)$ ai grupului O_h^7 . \square

Sistemul (12.15) corespunde sistemului de ecuații utilizat de modelul Born-von Karman în cazul cristalelor cu structura diamantului. În descrierea propusă mai sus el are o formă evident O_h^7 -invariantă în timp ce în descriere clasică stabilirea invarianței în raport cu acțiunea grupului O_h^7 este o problemă destul de dificilă. Relațiile (12.14) și sistemul (12.15) au în descrierea uzuală forme mult mai complicate (a se vedea [Ghă]) chiar dacă se iau în considerare numai interacțiunile cu vecinii de ordinul întâi.

Dacă căutăm soluții de forma

$$X_j(t, x) = \begin{cases} A_j \exp \left[i \left(\sum_{i=1}^4 k_i x_i - \omega t \right) \right] & \text{daca } x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 0 \\ B_j \exp \left[i \left(\sum_{i=1}^4 k_i x_i - \omega t \right) \right] & \text{daca } x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \end{cases}$$

unde $A = (A_1, A_2, A_3, A_4)$, $B = (B_1, B_2, B_3, B_4)$, $k \in \mathbb{R}_4^{\parallel}$, atunci sistemul (12.15) devine

$$m \omega^2 A_j = - \sum_{p=1}^4 \sum_{n=1}^4 \phi_{jn}^p [B_n \exp(i k_p) - A_n]$$

Bibliografie

- [Ba1] M. Baake and R. V. Moody: Multi-Component Model Sets and Invariant Densities, dans *Proc. of an Int. Conf. on Aperiodic Crystals APERIODIC 7, l'Alpe d'uez, 27-31 August 1997* (M. de Boissieu, J.-L. Verger-Gaugry et R. Currat eds.), World Scientific, Singapore, 1998.
- [Ba2] M. Baake and R. V. Moody: Self-similarities and invariant densities for model sets, in *Algebraic Methods and Theoretical Physics* (Y. St. Aubin ed.), Springer, New York (1997), in press.
- [Ba3] M. Baake, D. Joseph and P. Kramer: The Schur rotation as a simple approach to the transition between quasiperiodic and periodic phases, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (1991) L961-967.
- [Ba4] M. Baake, D. Joseph, P. Kramer and M. Schlottmann: Root lattices and quasicrystals, *J. Phys. A: Math. Gen.* **23** (1990) L1037-41.
- [Ba5] M. Baake, P. Kramer, M. Schlottmann and D. Zeidler: Planar patterns with five fold symmetry as sections of periodic structures in 4-space, *Int. J. Mod. Phys. B* 1990, 2217-68.
- [Ba6] M. Baake, M. Schlottmann and P. Jarvis: Quasiperiodic tilings with tenfold symmetry and equivalence with respect to local derivability, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (1992) 4637-54.
- [Br] D. Barache, B. Champagne and J. P. Gazeau: Pisot-Cyclotomic quasilattices and their symmetry semigroups, *Quasicrystals and Discrete Geometry* (Fields Institute Monograph Series), vol 10, ed. J. Patera, (Providence, RI: American Mathematical Society) 17-70.
- [Be] S. Berman and R. V. Moody: The algebraic theory of quasicrystals with five-fold symmetry, *J. phys. A: Math. Gen.*, **27** 115-130.
- [Bu] 2 Guillaume Bernuau: Thèse de doctorat, Paris-Dauphine, 1998.
- [Bo] M. de Boissieu, P. Stephens, M. Boudard, C. Janot, D. L. Chapman and M. Audier: Disorder and Complexity in the Atomic Structure of the Perfect Icosahedral Alloy Al-Pd-Mn, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 3538-3541.

- [Cox] S. M. Coxeter and W. O. Moser: *Generators and Relations for Discrete Groups*, (Springer, Berlin, 1965).
- [Crt] C. Curtis and I. Reiner: *Representation theory of finite groups and associative algebras*, Intersc. Publ., New York, 1962.
- [Cyc] H. L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch and B. Simon: *Schrödinger Operators with Application to Quantum Mechanics and Global Geometry*, (Springer-Verlag, Berlin, 1987) 164-216.
- [Des] D. Descombes, *Eléments de Théorie des Nombres*, PUF, Paris, 1986, p. 57.
- [Dim1] A. Dimakis, F. Müller-Hoissen and T. Striker: From continuum to lattice theory via deformation of the differential calculus, *Phys. Lett.* **300B** (1993) 141.
- [Dim2] A. Dimakis and F. Müller-Hoissen: Discrete differential calculus, graphs, topologies and gauge theory, *J. Math. Phys.* **35** (1994) 6703.
- [Dim3] A. Dimakis and F. Müller-Hoissen: Differential calculus and gauge theory on finite sets, *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** (1994) 3159-78.
- [Dim4] A. Dimakis, F. Müller-Hoissen and F. Vanderseypen: Discrete differential manifolds and dynamics on networks, *J. Math. Phys.* **36** (1995) 3771.
- [Dol] N. P. Dolbilin, J. C. Lagarias and Marjorie Senechal: Multiregular point systems, *Discrete & Comp. Geom.*, à paraître.
- [Dun1] M. Duneau, R. Mosseri and C. Oguey: Approximants of quasiperiodic structures generated by the inflation mapping, *J. Phys. A: Math. Gen.* **22** (1989) 4549-4564.
- [Dun2] M. Duneau: Quasiperiodic models with microcrystalline structures, *J. Phys. I France*, **1**(1991) 1591-1601.
- [Dun3] M. Duneau: N-dimensional crystallography and the icosahedral group, in *Lectures on Quasicrystals*, ed. F. Hippert and D. Gratias, Les Editions de Physique, 1994, Paris, 153-186.
- [Dun4] M. Duneau: Pavages, structures quasi-périodiques et modélisation des quasicristaux, in *Du Cristal à l'Amorphe*, Ed. C. Godrèche, Les Ulis: Les Editions de Physique, pp. 157-197.
- [Els] V. Elser: The diffraction pattern of projected structures. *Acta Cryst.* **A42** (1986) 35-43.
- [Fey] R. P. Feynman and R. A. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals*, (Mc Graw-Hill, New York, 1965).
- [Gaz1] J. P. Gazeau: Quasicrystals and their Symetries, in *Symmetries & structural properties of condensed matter*, ed. T. Lulek (World Scientific: Singapore), 1995, p. 369.

- [Gaz2] J. P. Gazeau and J. Patera: Tau-wavelets of Haar, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29** 4549-4559.
- [Gaz3] J. P. Gazeau: Pisot-cyclotomic Integers for Quasicrystals, in *The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*, ed. R. V. Moody, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997.
- [Gaz4] J. P. Gazeau and V. Spiridonov: Toward discrete wavelets with irrational scaling factor, *J. Math. Phys.* **37** (1996) 3001-3013.
- [Gaz5] J. P. Gazeau: Canonical quasilattices for labelling quasicrystalline sites, *Group 21 Glosar 1996*, ed. H. D. Doebner, W. Scherer and C. Schulte (World Scientific: Singapore).
- [Gha] A. K. Ghatak, L. S. Kothari: *An Introduction to Lattice Dynamics*, London; Addison-Wesley, 1972.
- [God] C. Godbillon: *Géométrie Différentielle et Mécanique Analytique*, Paris: Hermann, 1969.
- [Gra] D. Gratias, A. Katz and M. Quiquandon: Geometry of approximant structures in quasicrystals, *J. Phys.: Condens. Matter* **7** (1995) 9101-9125.
- [Gud1] S. P. Gudder: Discrete quantum mechanics, *J. Math. Phys.* **27** (1986) 1782-90.
- [Gud2] S. P. Gudder: *Quantum Probability*, (Academic Press, London, 1988) p. 263-300.
- [Hof1] A. Hof: On diffraction by aperiodic structures, *Comm. Math. Phys.* **169** (1995), 25-43.
- [Hof2] A. Hof: Diffraction by aperiodic structures, in *The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*, ed. R. V. Moody, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997, pp. 239-268.
- [Hus] D. Husemoller: *Fibre Bundles*, Mc. Graw-Hill, New York, 1966.
- [Int] International Union of Crystallography: *International Tables for Crystallography*, Edited by Theo Hahn, (Reidel, Dordrecht, 1983), Vol. A.
- [IUC] International Union of Crystallography. Report of the Executive Committee for 1991, *Acta Cryst. A* **48** (1992), 922-946.
- [Jnr] A. Janner and T. Janssen, *Phys. Rev.* **B15** (1977) 643.
- [Jan] C. Janot: *Quasicrystals - a Primer*, 2nd ed., Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [Jns] T. Janssen: Crystallography of Quasi-Crystals, *Acta Cryst.* **A42** 261-171.
- [Kal] P.A. Kalugin, A. Y. Kitaev and L. S. Levitov, *JETP Lett.* **41** (1985) 145.

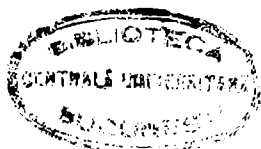
- [Kat1] A. Katz, M. Duneau: Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry, *J. Physique* **47** (1986) 181-196.
- [Kat2] A. Katz and D. Gratias: A geometric approach to chemical ordering in icosahedral structures, *J. Non-Cryst. Solids* **153&154** (1993) 187-195.
- [Kir] P. S. Kireev: *Semiconductor Physics*, (Mir, Moscow, 1974) p. 103-16.
- [Kob1] S. Kobayashi: *Transformation Groups in Differential Geometry*, Springer, Berlin, 1972.
- [Kob2] S. Kobayashi and K. Nomizu: *Foundations of Differential Geometry*, Vol. I, (Interscience Publishers, New York, 1963).
- [Kos] G. F. Koster: *Space Groups and Their Representations*, Academic Press, New York, 1957.
- [Kra1] P. Kramer and N. Neri: On periodic and non-periodic space fillings of \mathbb{E}^n obtained by projection, *Acta Cryst. A* **40** (1984) 580-587.
- [Kra2] P. Kramer: Continuous Rotation from Cubic to Icosahedral Order, *Acta Cryst. A* **43** (1987) 486-489.
- [Kra3] P. Kramer, M. Baake and D. Joseph: Schur rotation, transitions between quasiperiodic and periodic phases, and rational approximants, *J. Non-Cryst. Solids* **153&154** (1993) 650-653.
- [Kra4] P. Kramer and W. Haase: Group theory of icosahedral crystals, in *Introduction to the Mathematics of Quasicrystals*, ed. M. Jaric, Academic Press, San Diego, 1989, pp 81-146.
- [Lan] S. Lang: *Algebra*, (Addison-Wesley, Reading, MA, 1965) p. 33-40.
- [Lag1] J. C. Lagarias: Meyers concept of quasicrystal and quasiregular sets, *Comm. Math. Phys.* **179** (1996) 365-376.
- [Lag2] J. C. Lagarias: Geometric models for quasicrystals I. Delone sets of finite type, *Disc. & Comp. Geom.*, à paraître.
- [Lag3] J. C. Lagarias: Geometric models for quasicrystals II. Local rules under isometries, *Disc. & Comp. Geom.*, à paraître.
- [Lev] L. S. Levitov and J. Rhyner: Crystallography of quasicrystals; application to icosahedral symmetry, *J. Phys. France* **49** (1988) 1835-1849.
- [Man] N. S. Manton: Connections on discrete fibre bundles, *Comm. Math. Phys.* **113** (1987) 341-51.
- [Mar] J. Marbeau and S. Gudder: A quantum random walk, *Annales de la Fondation Louis de Broglie* **14** (1989) 439-50.

- [Mrs] D. Martinais: Classification des groupes cristallographiques de type icosaédrique en dimension 6, *C. R. Acad. Sci. Paris* 305 série I (1987) 509-512.
- [Mrt] J. Martinet: *Les réseaux parfaits des espaces Euclidiens* (Masson, Paris, 1996) pp. 312-347.
- [Mas1] Z. Masáková, J. Patera and E. Pelantová: Inflation centers of the cut and project quasicrystals. *J. Phys. A: Math. Gen.* 31 (1998) 1443-1453.
- [Mas2] Z. Masáková, J. Patera and E. Pelantová: Self-similar Delone sets and quasicrystals, *J. Phys. A: Math. Gen.* 31 (1998) 4927-4946.
- [Mey1] Y. Meyer: *Algebraic Numbers and Harmonic Analysis*, North-Holland, Amsterdam, 1972.
- [Mey2] Y. Meyer: Quasicrystals, Diophantine approximation and algebraic numbers, in *Beyond Quasicrystals*, eds. F. Axel and D. Gratias, Les éditions de physique, Springer-Verlag, New York, 1995, pp.3-16.
- [Moo] R. V. Moody: Meyer sets and their duals, in *The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*, ed. R. V. Moody, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1997, pp.403-441.
- [Nai] M. Naimark, A. Stern: *Théorie des Représentations des Groupes*, Mir, 1981.
- [Pat] C. Patel, W. F. Sherman and G. R. Wilkinson: Reinvestigation of the lattice dynamics of diamond on the basis of a Born-von Karman model, *J. Phys. C.: Solid State Phys.*, (17)1984, 6063-6069.
- [Pap] Z. Papadopoulos and P. Kramer: Models of icosahedral quasicrystals from 6D lattices, in *Proc. Intern. Conf. Aperiodic Crystals, Aperiodic 4*, Les Diablerets, Switzerland (1995) 70-75.
- [Ptr] J. Patera: Noncrystallographic root systems and quasicrystals, in *Mathematics of Long Range Aperiodic Order, Proc. NATO ASI, Waterloo, 1995* (R. V. Moody ed.), pp. 443-466, Dordrecht, Kluwer (1997).
- [Pat1] J. Patera: The Pentacrystals, in *Lectures Notes at the Winter School Beyond Quasicrystals*, Les Houches, France, 1994.
- [Ple] P. A. B. Pleasants: The construction of quasicrystals with arbitrary symmetry group, in *Proceedings of the 5th International Conference on Quasicrystals*, (C. Janot and R. Mosseri, eds.), World Scientific, Singapore, 22-30.
- [Ple1] P. A. B. Pleasants: Quasicrystallography: some interesting new patterns, dans *Elementary and analytic theory of numbers*, PWN, Warsaw, 1984.
- [Rad] O. Rădulescu and T. Janssen: Dynamics of lattice vibrations for one-dimensional commensurate and incommensurate composites with harmonic interaction, *J. Phys. A: Math. Gen.* 30 (1997) 4199-4214.

- [Roe] G. Roepstorff: *Path Integral Approach to Quantum Physics. An Introduction* (Springer-Verlag, Berlin, 1994) 242-80.
- [Schw] R. L. E. Schwarzenberger: *N-dimensional crystallography*, Pitman, London, 1980.
- [Sen] Marjorie Senechal: *Quasicrystals and Geometry*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1995.
- [Sen1] Marjorie Senechal: A Critique of the Projection Method, dans *Mathematics of Long Range Aperiodic Order, Proc. NATO ASI, Waterloo, 1995* (R. V. Moody ed.), pp. 521-548, Dordrecht, Kluwer (1997).
- [Ser] J.-P. Serre: *Linear Representations of Finite Groups*, Springer, New York, 1971.
- [She] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1951.
- [Sir] I. I. Sirotin și M. P. Șaskolskaia: *Fizica Cristalelor*, Editura Științifică și Enciclopedică, București, 1981.
- [Str] H. W. Streitwolf: *Group Theory in Solid-State Physics*, Macdonald, London, 1971, 68-74.
- [Tam1] N. Tamura and J.-L. Verger-Gaugry: Classification based on energetics of ideal icosahedral clusters and building blocks of quasicrystals and approximant crystals, *J. Non-Cryst. Solids*, **153&154** (1993), 546-551.
- [Tam2] N. Tamura: *Ordre Local Icosaédrique în les Cristaux Approximants et Structure des Phases Quasicristallines*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
- [Vai] K. Vainshtein: *Fundamentals of Crystals*, (Springer-Verlag, Berlin, 1994) p 101.
- [Ver1] J.-L. Verger-Gaugry: Approximate icosahedral periodic tilings with pseudo-icosahedral symmetry in reciprocal space, *J. Phys. France* **49** (1988) 1867.
- [Ver2] J.-L. Verger-Gaugry and N. Tamura: Construction of 6D icosahedral crystals from approximate icosahedral 3D crystalline structures and phase transition, *Phase Transitions* **32** (1991) 89-101.
- [Ver2] J.-L. Verger-Gaugry: Theory of G-approximant crystals with G, a non-crystallographic point group. I, *J. Phys. I France* **1** (1991) 1303-1320.
- [Ver3] J.-L. Verger-Gaugry: Interpenetrating pseudo-icosahedral clusters model for quasicrystals and consequences: asymmetry of diffraction peaks and pseudo-inflation rules, *J. Non-Cryst. Solids* **153&154** (1993), 276-281.

- [Ver4] J.-L. Verger-Gaugry and N. Cotfas: Models of quasicrystals with G -cluster microstructure. A mathematical approach, in *Proc. 6th Int. Conf. Quasicrystals*, Tokyo, 26-30 May 1997, eds. S. Takeuchi and T. Fujiwara, World Scientific, Singapore, 1998, 132-135.
- [Ver5] J.-L. Verger-Gaugry and J. Wolny: Generalized Meyer sets and Thue-Morse Quasicrystals with Toric Internal Spaces, *Prépublication de L'Institut Fourier*, No. 420, 1998.
- [Vog] U. Vogt and P. L. Ryder: A general algorithm for generating quasiperiodic lattices by the strip projection method, *J. Non-Cryst. Solids* 194 (1996) 135-144.
- [Wan] R. Wang, C. Qin, G. Lu, Y. Feng, and S. Xu: Projection description of cubic quasiperiodic crystals with phason strains, *Acta Cryst. A* 50(1994) 366-375.
- [Wei] J. Weidmann: *Linear Operators in Hilbert Spaces*, Springer, New York, 1980, 1449-153.
- [Weg] D. Weygand et J.-L. Verger-Gaugry: Modèle dn quasicristal covalent de bore pur, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 320, Série II b (1995), 253-257.
- [Wol] P. M. De Wolff, *Acta Cryst. A* 30 (1974) 777.
- [Yam1] H. Yamamoto, Quantum field theory on discrete space-time, *Phys. Rev. D* 30 (1984) 1727-32.
- [Yam2] H. Yamamoto, Quantum field theory on discrete space-time. II, *Phys. Rev. D* 32 (1985) 2659-65.

VERIFICAT
2017



VERIFICAT
2007

**Tiparul s-a executat sub c-da nr. 567/1999,
la Tipografia Editurii Universității din București**

ISBN: 973-575-370-7

Lei 1490

<https://biblioteca-digitala.ro> / <https://unibuc.ro>