

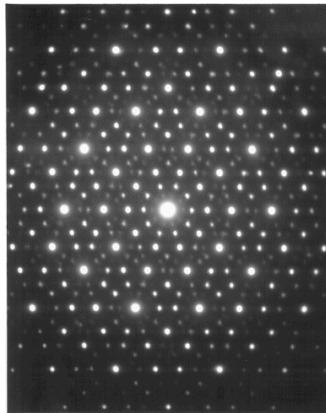
**Quasicristaux
et mesures presque-périodiques**

Claire Delplancke

Sous la direction de Yves Meyer

Stage de Licence 3
Ecole Normale Supérieure de Cachan
94235 Cachan - FRANCE

24 Janvier-24 Juin



Introduction.

Lors de ma présentation de mi-stage, je prévoyais de finir de comprendre le lien entre quasicristaux et mesures presque-périodiques, puis de m'intéresser à l'utilisation des quasicristaux en échantillonnage. Or, il s'est avéré que ce lien dépendait de la définition choisie pour la notion de quasicristal. C'est sur ce sujet que j'ai choisi de continuer à travailler.

Ce rapport se divise en 6 parties. Dans la première, on énonce quelques propriétés des fonctions presque-périodiques. Les trois parties suivantes sont consacrées à la définition de classes de plus en plus restreintes de quasicristaux : les ensembles de Meyer, les quasicristaux au sens de l'approximation diophantienne et les ensembles modèles, aussi connus sous le nom d'ensembles "coupe et projection". Dans la cinquième partie, on voit comment on peut définir des mesures de Radon presque-périodiques dont la transformée de Fourier est une mesure de Radon presque-périodique. La sixième partie s'intéresse à la figure de diffraction des quasicristaux.

Table des matières

1	Fonctions presque-périodiques	4
2	Ensembles de Meyer et ensembles harmonieux	5
3	Caractérisation par l'approximation diophantienne	7
4	Ensembles modèles	8
5	Mesures presque-périodiques et ensembles modèles	10
6	Quasicristaux et figures de diffraction	13

1 Fonctions presque-périodiques

On appelle polynôme trigonométrique les combinaisons linéaires finies d'exponentielles complexes de module 1 :

$$T(x) = \sum_{k=1}^n c_k e^{i\lambda_k \cdot x}, \quad x \in \mathbf{R}^n$$

où les c_k sont des nombres complexes et les λ_k appartiennent à \mathbf{R}^n . Une fonction est dite presque-périodique si elle peut être approchée uniformément sur \mathbf{R}^n par des polynômes trigonométriques.

Définition 1 Une fonction f à valeurs dans \mathbf{C}^n est dite presque-périodique si pour tout ϵ strictement positif, il existe un polynôme trigonométrique T tel que

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, |f(x) - T(x)| \leq \epsilon$$

Il existe une autre définition, due à Bohr, de la presque-périodicité :

Définition 2 Une fonction f est dite presque-périodique au sens de Bohr si pour tout ϵ strictement positif, il existe r strictement positif tel que toute boule de \mathbf{R}^n de rayon supérieur à r contient au moins un vecteur τ vérifiant :

$$\forall x \in \mathbf{R}^n, |f(x + \tau) - f(x)| \leq \epsilon \quad (\text{a})$$

Les τ vérifiant (a) sont les ϵ -presque-périodes de f .

Dans [2], il est montré que si f est continue, ces deux définitions sont équivalentes. On y trouve également les résultats suivants :

Théorème 1 Toute fonction continue presque-périodique est bornée sur \mathbf{R}^n .

Théorème 2 Si f est presque-périodique, il n'existe qu'un nombre dénombrable de λ tels que la quantité

$$\lim_{|B| \rightarrow \infty} \frac{1}{|B|} \int_{a+B} f(x) e^{-i \cdot \lambda x} dx$$

soit non nulle. Cette quantité est indépendante de a . De plus, l'égalité de Parseval est vérifiée :

$$\sum_{k=0}^{\infty} |a_n|^2 = \lim_{|B| \rightarrow \infty} \frac{1}{|B|} \int_B |f(x)|^2 dx$$

2 Ensembles de Meyer et ensembles harmonieux

La première définition possible d'un quasicristal généralise la notion de réseau (cristal périodique). Un réseau $\Lambda \subset \mathbf{R}^n$ est un sous-groupe additif à quotient compact. La propriété d'additivité peut s'écrire $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda$ où $\Lambda - \Lambda$ est l'ensemble de tous les $\lambda - \lambda'$, $\lambda \in \Lambda$, $\lambda' \in \Lambda$.

Définition 3 *Un ensemble Λ de \mathbf{R}^n est un ensemble de Delone s'il existe deux rayons $R_2 > R_1 > 0$ tels que toute boule de rayon R_1 , quel que soit son centre, contienne au plus un point de Λ tandis que toute boule de rayon R_2 , quel que soit son centre, contienne au moins un point de Λ .*

La première condition, dite condition de séparation, peut se réécrire de la manière suivante : il existe un r positif tel que $\lambda \in \Lambda$, $\lambda' \in \Lambda$ et $\lambda \neq \lambda'$ entraîne $|\lambda' - \lambda| \geq r$. Un ensemble de points vérifiant cette propriété est uniformément discret.

Un ensemble de points vérifiant la seconde propriété est relativement dense (cette terminologie est due à Besicovitch).

Un réseau Λ est évidemment un ensemble de Delone.

Nous définissons maintenant les ensembles de Meyer (cette terminologie a été introduite par J. C. Lagarias).

Définition 4 *Un ensemble de Meyer est un sous-ensemble Λ de \mathbf{R}^n qui vérifie les deux conditions suivantes :*

- (1.1) Λ est un ensemble de Delone
- (1.2) Il existe un ensemble fini $F \subset \mathbf{R}^n$ tel que $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$

On veut montrer que les ensembles de Meyer sont des ensembles harmonieux. Les ensembles harmonieux font intervenir la notion d' ϵ -dual, définie ci-après.

Définition 5 *Soit Λ un sous-ensemble de \mathbf{R}^n et $\epsilon \in (0, 2)$. Son ϵ -dual Λ_ϵ^* est l'ensemble de tous les τ vérifiant $\sup_{\lambda \in \Lambda} |\exp(i\tau\lambda) - 1| \leq \epsilon$.*

Le dual de Λ est son 0-dual au sens précédent, c'est-à-dire l'ensemble des τ vérifiant $e^{i\tau\lambda} = 1$, $\lambda \in \Lambda$.

Si Λ est \mathbf{Z} , son ϵ -dual est égal à son dual, qui est $2\pi\mathbf{Z}$, dès que ϵ est dans $(0, 1)$. Soit en effet x tel que pour tout entier k dans \mathbf{Z} on ait $|1 - e^{2\pi i x k}| \leq \epsilon$. L'ensemble des $z_k = e^{2\pi i x k}$ forme un sous-groupe du cercle unitaire \mathbf{T} constitué des nombres complexes de module 1. Ce sous-groupe est soit dense, soit un polygone régulier inscrit dans \mathbf{T} . Dans les deux cas, il ne peut être contenu dans un voisinage de 1 que s'il est réduit à $\{1\}$. Si Λ est \mathbf{Z}^n et si $\epsilon \in (0, 1)$, son ϵ -dual est $(2\pi)^n \mathbf{Z}^n$. En effet, si y vérifie $|1 - e^{2\pi i x z}| \leq \epsilon$ pour tout z dans \mathbf{Z}^n , il le vérifie en particulier pour les vecteurs de \mathbf{Z}^n dont seule une composante n'est pas nulle et on est ramené au cas de \mathbf{Z} . Supposons maintenant que Λ soit un réseau de \mathbf{Z}^n . Λ s'écrit sous la forme $\Lambda = A(\mathbf{Z}^n)$ où A est une matrice inversible de \mathbf{R}^n . Soit \tilde{A} la transposée de la comatrice de A . Elle vérifie $\tilde{A}A = (\det A) I_n$, où I_n est la matrice identité. Soit x dans Λ_ϵ^* . Pour tout z dans \mathbf{Z}^n , $|1 - \exp(ixA(z))| \leq \epsilon$. En posant $x = \frac{\tilde{A}(y)}{\det A}$, on trouve $|1 - \exp i \frac{\tilde{A}(y)}{\det A} A(z)| \leq \epsilon$, i.e. $|1 - \exp(iyz)| \leq \epsilon$. On obtient le lemme suivant :

Lemme 1 *Soit Λ le réseau $A(\mathbf{Z}^n)$ où A est une matrice inversible de \mathbf{R}^n et \tilde{A} la transposée de sa comatrice. Supposons que ϵ soit compris entre 0 et 1. Alors*

$$\Lambda_\epsilon^* = \Lambda^* = (2\pi)^n (\det A) \tilde{A}^{-1}(\mathbf{Z}^n)$$

Le dual de Λ^ est Λ .*

Définition 6 *Un ensemble Γ est harmonieux si pour tout ϵ positif, l'ensemble Λ_ϵ^* est relativement dense au sens de Besicovitch.*

Lemme 2 *Les ensembles de Meyer sont des ensembles harmonieux.*

La proposition suivante, démontré par R. V. Moody dans [6], donne une caractérisation des ensembles de Meyer :

Proposition 1 *Un ensemble Λ est de Meyer si et seulement si il satisfait aux deux conditions suivantes :*

(2.1) *Λ est un ensemble de Delone*

(2.2) *Pour tout ϵ compris entre 0 et 1, Λ_ϵ^* est un ensemble de Delone.*

3 Caractérisation par l'approximation diophantienne

Tout ensemble Λ de \mathbf{R}^n vérifie évidemment

$$(\Lambda_\epsilon^*)_\epsilon^* \supset \Lambda$$

Ceci nous amène à construire une classe plus restreinte de quasicristaux.

Définition 7 *Un sous-ensemble Λ de \mathbf{R}^n est un quasicristal au sens de l'approximation diophantienne s'il vérifie les trois conditions suivantes :*

- (3.1) Λ est un ensemble de Delone
- (3.2) Pour tout ϵ compris entre 0 et 1, Λ_ϵ^* est un ensemble de Delone.
- (3.3) Pour tout ϵ compris entre 0 et 1, l' ϵ -dual de Λ_ϵ^* est égal à Λ .

Les quasicristaux au sens de l'approximation diophantienne sont des ensembles de Meyer, mais la réciproque est fautive comme le montre le lemme suivant.

Lemme 3 *Soit $\Lambda = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\}$. Λ est un ensemble de Meyer et le ϵ -dual de son ϵ -dual est $(\Lambda_\epsilon^*)_\epsilon^* = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\} \cup \{\mathbf{Z} - \sqrt{2}\}$.*

Soit en effet $\tau = 2\pi x$ dans Λ_ϵ^* . On a à la fois $|1 - e^{2\pi i x k}| \leq \epsilon$ et $|1 - e^{2\pi i x (k + \sqrt{2})}| \leq \epsilon$ pour tout $k \in \mathbf{Z}$. D'après le lemme 1, la première condition implique $x \in \mathbf{Z}$. On a donc

$$\Lambda_\epsilon^* = (2\pi) \{x \in \mathbf{Z}; |1 - \exp(2i\pi x(k + \sqrt{2}))| \leq \epsilon, k \in \mathbf{Z}\}$$

Soit $z = 2\pi x \in (\Lambda_\epsilon^*)_\epsilon^*$.

$$\forall m \in \mathbf{Z}, |1 - \exp(2i\pi m\sqrt{2})| \leq \epsilon \quad \Rightarrow \quad |1 - \exp(2i\pi m y)| \leq \epsilon \quad (\text{a})$$

On introduit φ une fonction périodique de période 1 dans $C^\infty(\mathbf{R})$, nulle en dehors de $[-\eta, \eta] + \mathbf{Z}$, vérifiant $\int_{-\eta}^{\eta} \varphi = \alpha > 0$ et $\|\varphi\|_\infty = 1$. On écrit le développement en série de Fourier de φ :

$$\varphi(x) = \sum \gamma_k e^{2i\pi k x}$$

Pour tout m dans \mathbf{Z} , on a

$$|\varphi(m\sqrt{2})(\exp(2i\pi y m) - 1)| \leq \epsilon \quad (\text{b})$$

Comme $\{m\sqrt{2}; m \in \mathbf{N}\}$ est dense dans \mathbf{T} , la moyenne de $\varphi(m\sqrt{2})$ vérifie

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} \varphi(m\sqrt{2}) = \alpha$$

Or $\varphi(m\sqrt{2})e^{2i\pi ym} = \sum \gamma_k e^{2i\pi(y+m\sqrt{2})}$. Comme $(\gamma_k) \in l^1$, on peut intervertir les sommes dans l'expression de la moyenne de $\varphi(m\sqrt{2})e^{2i\pi ym}$. On utilise alors le lemme suivant : la limite de $\frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} e^{im\theta}$ est nulle sauf si $\theta \in \mathbf{Z}$. En réalisant la moyenne en m dans (b), on trouve que $y \in \mathbf{Z} + \mathbf{Z}\sqrt{2}$. Si $y = p + q\sqrt{2}$, (a) devient :

$$\forall m \in \mathbf{Z}, |1 - \exp(2i\pi m\sqrt{2})| \leq \epsilon \quad \Rightarrow \quad |1 - \exp(2i\pi m q\sqrt{2})| \leq \epsilon \quad (c)$$

On pose $t_m = \exp(2i\pi m\sqrt{2})$. (c) s'écrit alors

$$|1 - z_m| \leq \epsilon \quad \Rightarrow \quad |1 - z_m^q| \leq \epsilon$$

La densité de $\{z_m\}$ dans \mathbf{T} implique $q \in \{0, 1, -1\}$.

4 Ensembles modèles

On commence par la définition d'un ensemble modèle (cette terminologie est due à Yves Meyer). Soit Γ un réseau de $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ et p_1, p_2 les projections sur \mathbf{R}^n et sur \mathbf{R}^m . On suppose que $p_1 : \Gamma \rightarrow p_1(\Gamma) \subset \mathbf{R}^n$ est injective et que $p_2(\Gamma)$ est un sous-groupe dense de \mathbf{R}^m . Un ensemble K de \mathbf{R}^m est Riemann-intégrable si la frontière de K est de mesure nulle. Si K est Riemann-intégrable, K est de mesure non nulle si et seulement si son intérieur est non vide.

Définition 8 Soit K un ensemble Riemann-intégrable de \mathbf{R}^m d'intérieur non vide. L'ensemble modèle Λ défini par Γ et K est l'ensemble de tous les $\lambda = p_1(\gamma)$ tels que $\gamma \in \Gamma$ et $p_2(\gamma) \in K$.

On veut relier les ensembles modèles à la propriété d'approximation diophantienne. Supposons que K soit compact, Riemann-intégrable, connexe et que son intérieur contienne le point 0. Soit Γ^* le réseau dual de Γ , c'est-à-dire l'ensemble des $(\xi, \eta) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ tels que pour tout $(x, y) \in \Gamma$, $x \cdot \xi + y \cdot \eta \in 2\pi\mathbf{Z}$. Le réseau Γ peut s'écrire $\Gamma = A(\mathbf{Z}^{n+m})$ où A est

une matrice inversible de \mathbf{R}^{n+m} . En notant \tilde{A} la transposée de la comatrice de A , on a alors $\Gamma = \tilde{A}^{-1}(\mathbf{Z}^{n+m})$.

Alors $p_1 : \Gamma^* \rightarrow p_1(\Gamma^*)$ est encore une injection tandis que $p_2(\Gamma^*)$ est encore dense dans \mathbf{R}^m . On admet le lemme suivant :

Lemme 4 *Soit K un ensemble comme ci-dessus et Λ l'ensemble modèle défini par K . Alors $|e^{i\omega \cdot \lambda} - 1| \leq \epsilon$ uniformément par rapport à Λ est équivalent à la propriété suivante : il existe un $\gamma^* \in \Gamma^*$ tel que*

(a) $\omega = p_1(\gamma^*)$

(b) Si $2 \sin(\theta/2) = \epsilon$, $0 < \theta < \pi/2$, alors pour tout $y \in K$ on a $|y \cdot p_2(\gamma^*)| \leq \theta$.

Définition 9 *Soit K un ensemble compact convexe dont l'intérieur contient 0. Son ensemble dual est l'ensemble convexe défini par*

$$K^* = \{y; |x \cdot y| \leq 1\}$$

Soit ϵ et θ tels que $2 \sin(\theta/2) = \epsilon$, $0 < \theta < \pi/2$. On définit K_ϵ^* l' ϵ -dual de K comme l'ensemble des z vérifiant $\sup_{y \in K} |z \cdot y| \leq \theta$. On remarque que $K_\epsilon^* = \theta K^*$. D'après le lemme 4, $\Lambda_\epsilon^* = \{p_1(\lambda^*); \gamma^* \in \Gamma^*, |y \cdot p_2(\gamma^*)| \leq \theta\}$. On voit donc que Λ_ϵ^* est un ensemble modèle défini par $K_\epsilon^* = \theta K$. Or, $(\theta K)^* = \frac{1}{\theta} K^*$, donc le ϵ -dual de Λ_ϵ^* est Λ . Le théorème suivant résume cette discussion.

Théorème 3 *Soit K un ensemble Riemann-intégrable, compact, convexe, et symétrique par rapport à 0. Soit Λ l'ensemble modèle défini par $\{\lambda = p_1(\gamma); \gamma \in \Gamma \text{ et } p_2(\gamma) \in K\}$. Alors son ϵ -dual*

$$\Lambda_\epsilon^* = \{y \in \mathbf{R}^n; |e^{i\lambda \cdot y} - 1| \leq \epsilon, \lambda \in \Lambda\}$$

est aussi un ensemble modèle, défini par

$$\Lambda_\epsilon^* = \{\lambda = p_1(\gamma^*); \gamma^* \in \Gamma^* \text{ and } p_2(\gamma^*) \in K^*\}$$

et le ϵ -dual de Λ_ϵ^ est Λ .*

Ce théorème montre que sous des hypothèses favorables sur K , il existe une analogie de structure entre Λ_ϵ^* et Λ .

Il montre aussi que les ensembles modèles sont des quasicristaux au sens de l'approximation diophantienne. La réciproque est fautive :

Lemme 5 *L'ensemble $\Lambda = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\} \cup \{\mathbf{Z} - \sqrt{2}\}$ est un quasicristal au sens de l'approximation diophantienne. Ce n'est pas un ensemble modèle.*

Supposons par l'absurde qu'il existe un compact Riemann-intégrable K de \mathbf{R}^m et un réseau Γ de \mathbf{R}^{m+1} tels que $p_1 : \Gamma \rightarrow p_1(\Gamma) \subset \mathbf{R}^n$ soit injective, $p_2(\Gamma)$ soit un sous-groupe dense de \mathbf{R}^m et $\Lambda = \{p_1(\gamma) ; p_2(\gamma) \in K\}$.

Il existe $\alpha \neq 0$ dans Γ tel que $p_1(\alpha) = \sqrt{2}$ et $\beta \neq 0$ dans Γ tel que $p_1(\beta) = 1$. Comme $\sqrt{2} + k = p_1(\alpha + k\beta)$ et que p_1 est injective sur Γ , $\{p_2(\alpha + k\beta)\} \subset K$. Comme K compact, cela implique que $p_2(\beta) = 0$. Complétons (β) en $(\beta, \gamma_1, \dots, \gamma_m)$ une base de Γ . Alors $p_2(\Gamma)$ est le sous-groupe de \mathbf{R}^m engendré par l'ensemble à m éléments $\{p_2(\gamma_1), \dots, p_2(\gamma_m)\}$. Le sous-groupe $p_2(\Gamma)$ ne peut donc pas être dense dans \mathbf{R}^m . On a obtenu une contradiction.

5 Mesures presque-périodiques et ensembles modèles

Une mesure μ est dite presque-périodique si pour toute fonction f de $C_c(\mathbf{R}^n)$ (fonctions continues à support compact), la convolée $\mu * f$ est presque-périodique au sens de Bohr. Le problème mathématique auquel on s'intéresse dans cette partie consiste à identifier les mesures de Radon μ presque-périodiques telles que $\hat{\mu}$ soit encore une mesure de Radon presque-périodique. On cherche les mesures μ sous la forme $\sum_{\lambda \in \Lambda} a_\lambda \delta_\lambda$, où Λ est un quasicristal.

Si Λ est le réseau \mathbf{Z} et $\mu = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \delta_n$, la formule sommatoire de Poisson s'écrit

$$\hat{\mu} = 2\pi \sum_{n \in \mathbf{Z}} \delta_n$$

On peut généraliser ce résultat aux réseaux de \mathbf{Z}^n : Si Λ est le réseau $A(\mathbf{Z}^n)$ et $\mu = \sum_{\lambda \in \Lambda} \delta_\lambda$, alors

$$\hat{\mu} = \frac{(2\pi)^n}{\text{vol}(\Gamma)} \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} \delta_{\lambda^*}$$

où $\Lambda^* = A^{*-1}$. La quantité $vol(\Gamma)$ représente le volume d'un domaine élémentaire de Γ . Il est égal à $|det(A)|$.

Cependant, ce problème n'est pas stable comme le montre le théorème suivant :

Théorème 4 *Soit (ϵ_n) une suite de $l_1(\mathbf{Z})$. On pose $\mu = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \delta_{n+\epsilon_n}$. Alors (μ et $\hat{\mu}$ sont presque-périodiques) \Rightarrow (la suite (ϵ_n) est nulle).*

On commence par montrer le lemme suivant :

Lemme 6 *Soit (ϵ_n) une suite de $l_1(\mathbf{Z})$ avec un nombre infini de termes non nuls et $f(x) = \sum (e^{i\epsilon_n x} - 1)e^{ikx}$. Alors f n'est pas bornée sur \mathbf{R} , en particulier elle n'est pas presque-périodique.*

Le théorème suivant montre qu'il est possible d'obtenir une formule analogue si Λ est un ensemble modèle. Soit Λ l'ensemble modèle défini comme ci-dessus par $\Gamma \subset \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^m$ and $K \subset \mathbf{R}^m$. On suppose toujours que K est Riemann-intégrable et on désigne par φ toute fonction de \mathbf{R}^m nulle en-dehors de K .

Les coefficients $w(\lambda)$, $\lambda \in \Lambda$, sont définis sur l'ensemble modèle Λ par $w(p_1(\gamma)) = \varphi(p_2(\gamma))$, $\gamma \in \Gamma$. Si φ est la fonction indicatrice de K $w(\lambda) = 1$ sur Λ et $w(p_1(\gamma)) = 0$ si $p_1(\gamma) \notin \Lambda$, $\gamma \in \Gamma$.

Avec ces notations, on obtient

Théorème 5 *Soit μ la somme $\sum_{\lambda \in \Lambda} w(\lambda)\delta_\lambda$ de masses de Dirac sur Λ où les coefficients sont définis comme ci-dessus. Alors la transformée de Fourier $\hat{\mu}$ de μ est donnée par*

$$\hat{\mu} = \sum_{\Gamma^*} \omega(p_2(\gamma^*)) \delta_{p_1(\gamma^*)}$$

où les coefficients duaux $\omega(p_2(\gamma^*))$ sont définis par

$$\omega(y) = \frac{(2\pi)^n}{vol(\Gamma)} \hat{\varphi}(y) \quad , \quad y = p_2(\gamma^*) \quad , \quad \gamma^* \in \Gamma^*$$

Preuve : soit f une fonction de $C_c^\infty(\mathbf{R}^n)$.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mu}, f \rangle &= \langle \mu, \hat{f} \rangle \text{ (par définition)} \\
&= \sum_{\gamma \in \Gamma} \varphi(p_1(\gamma)) \hat{f}(p_2(\gamma)) \\
&= \frac{(2\pi)^n}{\text{vol}(\Gamma)} \sum_{\gamma \in \Gamma^*} \hat{\sigma}, \quad \sigma = \varphi(p_1(\gamma)) \hat{f}(p_2(\gamma)) \text{ (formule de Poisson)} \\
&= \frac{(2\pi)^n}{\text{vol}(\Gamma)} \sum_{\gamma \in \Gamma^*} \hat{\varphi}(p_1(\gamma)) f(p_2(\gamma))
\end{aligned}$$

ce qui prouve que

$$\hat{\mu} = \frac{(2\pi)^n}{\text{vol}(\Gamma)} \sum_{\gamma \in \Gamma^*} \hat{\varphi}(p_1(\gamma)) \delta_{p_2(\gamma)}$$

Le choix de φ est déterminé par les conditions

- μ est une mesure de Radon
- $\hat{\mu}$ aussi

Il est difficile de caractériser φ . On se contente des conditions suffisantes suivantes :

- $|\varphi(x)| \leq \frac{C}{1+|x|^{2n+1}}$
- $|\hat{\varphi}(\chi)| \leq \frac{C'}{1+|\chi|^{2n+1}}$

Si μ est définie comme dans le théorème 5, μ et $\hat{\mu}$ sont presque-périodiques. C'est une conséquence du lemme suivant :

Lemme 7 *Soit μ une mesure de \mathbf{R}^n telle que μ et $\hat{\mu}$ soient toutes deux atomiques et vérifient*

$$\sup_{x \in \mathbf{R}^n} |\mu|(B+x) < \infty$$

et

$$\sup_{x \in \mathbf{R}^n} |\hat{\mu}|(B+x) < \infty$$

où B est la boule-unité de \mathbf{R}^n . Alors μ et $\hat{\mu}$ sont presque-périodiques.

6 Quasicristaux et figures de diffraction

L'International Union for Crystallography définit les cristaux a périodiques, ou quasicristaux, comme les métaux dont la figure de diffraction est essentiellement a périodique ([3]). On modélise le métal par l'ensemble Λ où chaque λ correspond au centre d'un atome. On lui associe la somme de masses de Dirac dont le coefficient vaut 1 à l'emplacement de chaque atome et 0 ailleurs :

$$\mu = \sum_{\lambda \in \Lambda} \delta_\lambda$$

Si on trouve

$$\hat{\mu} = \sum_{\lambda^* \in \Lambda^*} a_{\lambda^*} \delta_{\lambda^*} + \nu_{continue}$$

où $\nu_{continue}$ est continue et les a_{λ^*} non tous nuls, on dit que la figure de diffraction de Λ est essentiellement discrète. On voit apparaître sur la figure de diffraction des pics, situés aux points λ^* de Λ^* , d'intensité lumineuse proportionnelle à $|a_{\lambda^*}|^2$.

Supposons que Λ soit un ensemble modèle défini par le réseau Γ et le compact Riemann-intégrable K . On suppose toujours que $p_1 : \Gamma \rightarrow p_1(\Gamma) \subset \mathbf{R}^n$ est injective et que $p_2(\Gamma)$ est un sous-groupe dense de \mathbf{R}^m , et de plus que $p_2 : \Gamma \rightarrow p_2(\Gamma) \subset \mathbf{R}^m$ est injective et que $p_1(\Gamma)$ est un sous-groupe dense de \mathbf{R}^n . Le théorème 2 nous donne alors l'expression de $\hat{\mu}$. Ici $\varphi = \mathbf{1}_K$ et $\mathbf{1}_K$ représente la fonction indicatrice de K .

$$\hat{\mu} = \sum_{\Gamma^*} \omega(p_2(\gamma^*)) \delta_{p_1(\gamma^*)}$$

où

$$\omega(y) = \frac{(2\pi)^n}{\text{vol } \Gamma} \hat{\mathbf{1}}_K(y) \quad , \quad y = p_2(\gamma^*) \quad , \quad \gamma^* \in \Gamma^*$$

Les pics lumineux apparaissent à chaque point θ de $\Theta = \{p_1(\gamma^*) ; \gamma^* \in \Gamma^*, \omega(p_2(\gamma^*)) \neq 0\}$.

Or, $\hat{\mathbf{1}}_K$ n'est pas à support compact. Comme on a supposé que $p_1(\Gamma)$ est un sous-groupe dense de \mathbf{R}^n , Λ^* est dense dans \mathbf{R}^n , ce qui semble absurde du point de vue de la physique. Cependant, l'appareil de mesure a une sensibilité, que l'on notera s , en-dessous de laquelle il ne distingue rien. Par ailleurs,

$|\hat{\mathbf{1}}_K(\chi)| \leq \frac{C}{1+|\chi|^{\frac{n+1}{2}}}$ si par exemple K est une boule. Les pics sont donc en réalité observés sur l'ensemble

$$\begin{aligned}\Theta_s &= \{p_1(\gamma^*); \gamma^* \in \Gamma^*, |\omega(p_2(\gamma^*))|^2 \geq s\} \\ &= \{p_1(\gamma^*); \gamma^* \in \Gamma^*, |p_2(\gamma^*)| \in B(0, \frac{C'}{s^{n+1}})\}\end{aligned}$$

où $B(0, R)$ représente la boule de centre 0 et de rayon R . Θ_s est ainsi défini comme un ensemble modèle : la sensibilité s introduit une “coupe”. Si l'on augmente la sensibilité (s diminue), on voit plus de points lumineux, conformément à ce qui est décrit dans [7].

Les ensembles modèles sont donc des quasicristaux au sens physique. On ne peut rien dire sur les ensembles de Meyer en général. Considérons par exemple $\Lambda = \{\dots, -6, -4, -2, 0, 1, 3, 5, \dots\}$ qui est un ensemble de Meyer. La transformée de Fourier de la somme des masses de Dirac sur Λ s'écrit : $\hat{\mu}(\chi) = C \tan \frac{\chi}{2}$. On ne voit pas apparaître de masses de Dirac. La figure de diffraction n'est pas essentiellement discrète.

Il faut tenir compte du fait qu'on observe pas le quasicristal infini Λ , auquel est associé la somme de masses de Dirac $\mu = \sum_{\lambda \in \Lambda} \delta_\lambda$, mais un échantillon de celui-ci, noté $\Lambda_R = \Lambda \cap B(0, R)$. La somme de masses de Dirac associée est $\mu_R = \sum_{\lambda \in \Lambda_R} \delta_\lambda = \mu \cdot \mathbf{1}_{B(0, R)}$

La transformée de Fourier de μ_R est $\hat{\mu}_R = \hat{\mu} * \hat{\mathbf{1}}_{B(0, R)} = \hat{\mu} * \frac{\sin Rx}{x}$

Théorème 6

$$\hat{\mu}_R(x) = \sum_{y \in \Lambda^*} \frac{\sin R(x-y)}{R} \rightarrow \hat{\mu} = 2\pi \sum_{y \in \Lambda^*} \delta_y$$

Cette convergence s'effectue au sens des distributions. Elle n'a pas lieu au sens des mesures.

Commençons par démontrer le lemme suivant.

Lemme 8

$$\frac{\sin mx}{x} \rightarrow \pi \delta_0$$

Cette convergence a lieu au sens des distributions, mais pas au sens des mesures.

Comme la convergence ne se fait pas au sens des mesures, il risque de se produire un effet analogue à la suroscillation de Gibbs : même en augmentant la taille de l'échantillon observé, on conserve des taches diffuses assez lumineuses. Je ne sais pas s'il s'agit d'un problème de modélisation ou d'un effet réellement observé en cristallographie. ¹

¹Dans [5], A. Hof modélise autrement la figure de diffraction. Il introduit l'auto-corrélation $\nu_R = \sum_{x,y \in \Lambda_R} \delta_{x-y}$ et considère que la figure de diffraction est représentée par

$$\hat{\nu} = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{R} \hat{\nu}_R$$

si cette limite existe. Si Λ est un ensemble modèle, il prouve que cette limite existe au sens des mesures et que sa partie discrète est $\sum_{y \in \Lambda^*} |\omega_y|^2 \delta_y$. A la limite, on a donc la même partie discrète quelle que soit la modélisation choisie. Pour un échantillon grand mais fini, les deux modélisations induisent des résultats différents.

Conclusion

Nous avons proposé 4 définitions différentes, non-équivalentes d'un quasicristal :

- $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$ et Λ Delone
- approximation diophantienne
- "coupe et projection"
- Λ satisfaisant une formule de Poisson approchée

Il n'est pas encore clair de savoir quelle est la meilleure définition.

Références

- [1] Yves Meyer, *Quasicrystals, diophantine approximation and algebraic numbers*. Lecture notes at the Winter School Beyond Quasicrystals, 1994, revised version.
- [2] Constantin Corduneanu, *Almost periodic function*. Chelsea publishing company, 1989 [première édition en anglais : Wiley Interscience, 1961].
- [3] Marjorie Senechal, *What is a quasicrystal ?* Notices of the AMS, vol.53, 8 (2006) 886-887.
- [4] J. C. Lagarias, *Meyer's concept of quasicrystal and quasiregular sets*. Comm. Math. Phys. **179** (1996) 365-376.
- [5] A. Hof, *On diffraction by aperiodic structures*. Comm. Math. Phys. **169** (1996) 25-43.
- [6] R. V. Moody, *Long-range order and diffraction*. Proceedings of a Conference on Groups and Lie Algebras, Ed. Ken-Ichi Sinoda, Sophia Kokyuroku in Mathematics 46, 2006.
- [7] J. B. Suck, M. Schreiber, P. Häussler, *Quasicrystals : an introduction to structure, physical properties and applications*, Springer, Berlin, 2004.
- [8] W. Rudin, *Real and Complex Analysis*.
- [9] S. Lang, *Algèbre*.
- [10] Wikipédia, *Almost Periodic Function*.