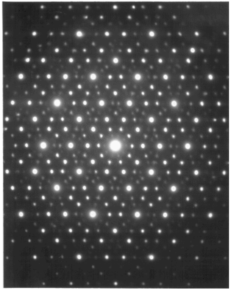
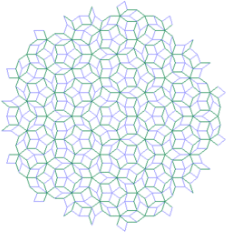
Quasicristaux et mesures presque-périodiques

Claire Delplancke
Sous la direction d’Yves Meyer

24 juin 2010

Qu’est-ce qu’un quasicristal ?





Un réseau est un sous-groupe de $\mathbf{R}^n$ à quotient compact. On peut l'écrire sous la forme $\Lambda = A(\mathbf{Z}^n)$ où A est une matrice inversible de $\mathbf{R}^n$.

La propriété de sous-groupe peut s'écrire $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda$.

Soit Λ un sous-ensemble de $\mathbf{R}^n$

- Λ est **uniformément discret** si $\exists\, R_1 > 0$ tel que toute boule de rayon R_1 contienne au plus un point de Λ.
- Λ est **relativement dense** si $\exists\, R_2 > 0$ tel que toute boule de rayon R_2 contienne au moins un point de Λ.
- Λ est un **ensemble de Delone** s'il vérifie les deux propriétés précédentes.

Première notion de quasicristal

Un **ensemble de Meyer** est un ensemble de Delone Λ tel qu'il existe un ensemble fini $F \subset \mathbf{R}^n$ tel que $\Lambda - \Lambda \subset \Lambda + F$.

Soit $\Lambda \subset \mathbf{R}^n$ et $\epsilon \in (0,2)$. Son ϵ-**dual** est Λ_ϵ^* :

$$\Lambda_\epsilon^* = \{\tau\,;\,|\exp(i\tau\lambda) - 1| \leq \epsilon,\ \lambda \in \Lambda\}$$

Si Λ est le réseau $A(\mathbf{Z}^n)$ et si $\epsilon \in (0,1)$, alors

$$\Lambda_\epsilon^* = \Lambda_0^* = (2\pi)^n (\det A) \tilde{A}^{-1}(\mathbf{Z}^n)$$

où $\tilde{A}$ la transposée de la comatrice de A. Le dual de Λ_ϵ^* est Λ.

Théorème

Un ensemble Λ est un ensemble 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.

Tout ensemble Λ de $\mathbf{R}^n$ vérifie évidemment $(\Lambda_\epsilon^*)_\epsilon^* \supset \Lambda$.

Seconde notion de quasicristal

Un 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) $\forall \epsilon \in (0, 1)$, Λ_ϵ^* est un ensemble de Delone.

(3.3) $\forall \epsilon \in (0, 1)$, l'$\epsilon$-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 fausse. Contre-exemple : si

$$\Lambda = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\}$$

Alors

$$(\Lambda_\epsilon^*)_\epsilon^* = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\} \cup \{\mathbf{Z} - \sqrt{2}\}$$

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 $p_1 : \Gamma \to p_1(\Gamma) \subset \mathbf{R}^n$ est injective et que $p_2(\Gamma)$ est un sous-groupe dense de $\mathbf{R}^m$.

Troisième notion de quasicristal

Soit $K \subset \mathbf{R}^m$ un ensemble compact, Riemann-intégrable et d'intérieur non vide.
L'**ensemble modèle ou "coupe et projection"** Λ défini par Γ et K est :

$$\Lambda(\Gamma, K) = \{\lambda = p_1(\gamma)\,;\, \gamma \in \Gamma,\, p_2(\gamma) \in K\}$$

Supposons de plus que K est convexe et symétrique par rapport à 0. On définit le dual de K par $K^* = \{z\,;\,|z \cdot y| \leq 1,\ y \in K\}$.
Soit $\epsilon \in (0,1)$ et θ tel que $2\sin(\theta/2) = \epsilon$, $0 < \theta < \pi/2$.

Théorème

Soit Γ et K comme ci-dessus. Alors le ϵ-dual de l'ensemble modèle défini par Γ et K est l'ensemble modèle défini par Γ^*et θK^* :

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

et le ϵ-dual de Λ_ϵ^* est Λ.

Un ensemble "coupe et projection" est un quasicristal au sens de l'approximation diophantienne, mais la réciproque est fausse. Contre-exemple :

$$\Lambda = \mathbf{Z} \cup \{\mathbf{Z} + \sqrt{2}\} \cup \{\mathbf{Z} - \sqrt{2}\}$$

La formule de Poisson en dimension 1 s’écrit

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

Soit Λ un ensemble “coupe et projection” défini par Γ et K : $\Lambda = \{\lambda = p_1(\gamma)\,;\, \gamma \in \Gamma,\, p_2(\gamma) \in K\}$. Soit φ une fonction de $\mathbf{R}^m$ nulle en-dehors de K.

Théorème

Soit μ la somme de masses de Dirac sur Λ :

$$\mu = \sum_{\gamma \in \Gamma,\, p_2(\gamma) \in K} \varphi(p_2(\gamma))\delta_{p_1(\gamma)}$$

Alors sa transformée de Fourier est

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

Soit f une fonction de $\mathbf{R}^n$ et $\epsilon > 0$. Les τ vérifiant (a) sont les ϵ-presque-périodes de f :

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

La fonction f est **presque-périodique au sens de Bohr** si pour tout $\epsilon > 0$, l'ensemble de ses ϵ-presque-périodes est relativement dense dans $\mathbf{R}^n$.

Une mesure de $\mathbf{R}^n$ est presque-périodique si $\forall f \in C_c(\mathbf{R}^n)$, la convolée $\mu * f$ est presque-périodique.

Théorème

Soit Λ un ensemble “coupe et projection” et $\varphi \in C_c(\mathbf{R}^n)$ telle que $|\varphi(x)| \leq \frac{C}{1+|x|^{2n+1}}$ et $|\hat{\varphi}(\chi)| \leq \frac{C'}{1+|\chi|^{2n+1}}$.
Soit

$$\mu = \sum_{\gamma \in \Gamma,\, p_2(\gamma) \in K} \varphi(p_2(\gamma)) \delta_{p_1(\gamma)}$$

Alors μ et $\hat{\mu}$ sont des mesures de Radon presque-périodiques.

Soit Λ un ensemble modélisant un métal et soit μ la somme de masses de Dirac sur Λ :

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

La figure de diffraction du métal est modélisée par la transformée de Fourier de $\hat{\mu}$. Si

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

on observe des pics lumineux d’intensité proportionnelle à $|a_{\lambda^*}|^2$. La figure de diffraction est **essentiellement discrète.**

Quatrième notion de quasicristal

En cristallographie, Λ est un **cristal apériodique** si sa figure de diffraction est essentiellement discrète.

Soit Λ soit un ensemble “coupe et projection” (Γ,K). On suppose $p_1 : \Gamma \to p_1(\Gamma) \subset \mathbf{R}^n$ injective, $p_2(\Gamma)$ dense dans $\mathbf{R}^m$, $p_2 : \Gamma \to p_2(\Gamma) \subset \mathbf{R}^m$ injective, et $p_1(\Gamma)$ dense dans $\mathbf{R}^n$. Soit

$$\mu = \sum_{\gamma \in \Gamma,\, p_2(\gamma) \in K} \delta_{p_1(\gamma)}$$

Alors

$$\hat{\mu} \ = \ \frac{(2\pi)^n}{vol(\Gamma)} \sum_{\Gamma^*} \mathbf{1}_K(p_2(\gamma^*))\delta_{p_1(\gamma^*)}$$

Les pics lumineux apparaissent à chaque point θ de $\Theta = \{p_1(\gamma^*) \,;\, \gamma^* \in \Gamma^*\}$, dense dans $\mathbf{R}^n$: absurde ?
Soit s la sensibilité de l'appareil de détection. Les pics lumineux apparaissent en réalité à chaque point θ de $\Theta_s = \{p_1(\gamma^*) \,;\, \gamma^* \in \Gamma^*, |p_2(\gamma^*)| \in B(0, \frac{C'}{s^{n+1}})\}$.

On n'observe pas le quasicristal infini Λ, auquel est associé $\mu = \sum_{\lambda\in\Lambda} \delta_\lambda$,
mais un échantillon $\Lambda_R = \Lambda \cap B(0, R)$, auquel est associé $\mu_R = \sum_{\lambda\in\Lambda_R} \delta_\lambda = \mu \cdot \mathbf{1}_{B(0,R)}$.
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

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

Cette convergence s'effectue au sens des distributions. Elle n'a pas lieu au sens des mesures. Effet sur la figure de diffraction ?

- Yves Meyer, *Quasicrystals, diophantine approximation and algebraic numbers*. Lecture notes at the Winter School Beyond Quasicrystals, 1994, revised version.
- Constantin Corduneanu, *Almost periodic function*. Chelsea publishing company, 1989 [première édition en anglais : Wiley Interscience, 1961].
- Marjorie Senechal, *What is a quasicrystal ?* Notices of the AMS, vol.53, 8 (2006) 886-887.
- J. C. Lagarias, *Meyer'concept of quasicrystal and quasiregular sets*.Comm. Math. Phys. **179** (1996) 365-376.
- A. Hof, *On diffraction by aperiodic structures*.Comm. Math. Phys. **169** (1996) 25-43.
- 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.

- J. B. Suck, M. Schreiber, P. Häussler, *Quasicrystals : an introduction to structure, physical properties and applications*, Springer, Berlin, 2004.
- W. Rudin, *Real and Complex Analysis*.
- S. Lang, *Algèbre*.
- Wikipédia, *Almost Periodic Function*.