

Dominos, apériodicité et quasicritaux (4/4)

Thomas Fernique

Dubna, 19-29 juillet 2012

1 Quasicristaux

Qu'est qu'un matériau ordonné? Assez naturellement, on pense à un motif répété périodiquement (*i.e.*, sur un réseau). C'est la notion de *crystal*, qui prend forme au 18^{ème} siècle et culmine avec les classifications de Bravais (1850) et Fedorov (1891).

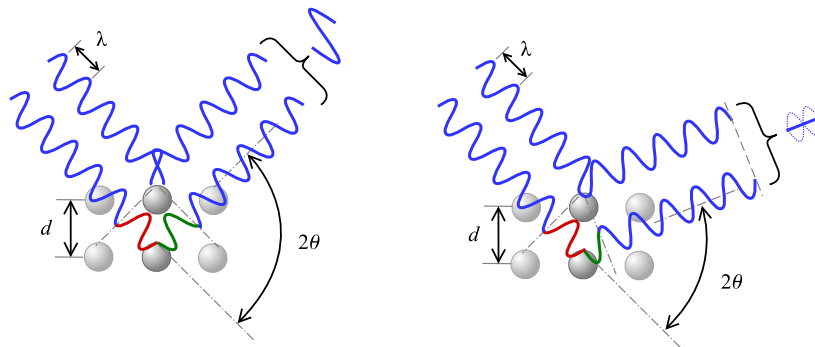


FIGURE 1 – Diffraction par rayon X

La structure des cristaux a beaucoup été étudiée par diffraction de rayons X (Von Laue, 1912). Tous les cristaux ont une figure de diffraction “essentiellement discrète”, *i.e.*, un fond uniforme sombre sur lequel se détachent des points très lumineux (les pics de Bragg), ce qui a généralement été considéré comme une propriété caractérisant les cristaux.

Tout allait pour le mieux jusqu'à ce qu'on découvre expérimentalement (Shechtman, 1982) un matériau avec une figure de diffraction essentiellement

discrète mais avec une symétrie d'ordre 5 (invariance par rotation d'angle $\frac{2\pi}{5}$), ce qui semblait contredire la *restriction cristallographique* :

Proposition 1 *Un réseau admet une symétrie d'ordre n ssi $n \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$.*

Preuve. Si une rotation d'angle θ préserve un réseau, alors sa matrice dans une base de ce réseau est entière. Et donc aussi sa trace, qui vaut $2 \cos(\theta)$. \square

S'ensuivit une longue controverse (avec notamment le doublement nobélisé Linus Pauling comme contradicteur de poids) conduisant dix ans après à redéfinir la notion de cristal (et trente ans après à la nobélisation de Shechtman) :

Définition 1 (IUCr, 1992) *Un matériau est un cristal si sa figure de diffraction essentiellement discrète. Un quasicristal est alors un cristal non périodique.*

Mais quelles distributions de matière ont une figure de diffraction essentiellement discrète ? Il y a au moins tous les *pavages par losanges plans* (Hof, 1995).¹

Par ailleurs, la distribution d'une matière est gouvernée par des interactions énergétiques locales. Donc pour être un modèle satisfaisant de quasicristal, un pavage ne doit pas seulement être quasipériodique mais sofique ou de type fini. Peut-on tous les classifier, comme ont fait Bravais et Fedorov pour les cristaux ?

2 Pavages par losanges

2.1 Définitions et résultats

On considère les pavages du plan par les losanges dont les arêtes sont dirigées par deux parmi n vecteurs $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ unitaires et deux à deux non colinéaires.

Définition 2 *Le relevé d'un pavage par losanges est une surface de \mathbb{R}^n obtenue en "relevant" chaque \vec{v}_k sur \vec{e}_k – le $k^{\text{ème}}$ vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^n .*

Rq : le relevé d'un pavage est unique à translation près ; il caractérise le pavage.

Définition 3 *Un pavage par losanges est plan s'il existe un plan $E \subset \mathbb{R}^n$ et $w \geq 1$ tels que ce pavage admet un relevé inclus dans la "tranche" $E + [0, w]^n$. Le plan E est appelé pente du pavage, et le plus petit w possible son épaisseur.*

1. La diffraction est ici théorique : à toute paire (x, y) de sommets du pavage correspond un Dirac δ_{x-y} , la diffraction étant la transformée de Fourier de la somme de ces Dirac.

Rq : pente et épaisseur sont définis de manière unique.

Théorème 1 *Les pavages plans d'épaisseur unité existent pour toute pente et sont périodiques si cette pente est rationnelle, quasipériodiques sinon.*

Rq : la figure de diffraction d'un pavage plan est d'autant moins discrète que l'épaisseur augmente, mais reste essentiellement discrète (ordre à longue portée).

On veut donc savoir quels pavages plans sont de type fini (à défaut, sofiqes), plus exactement quelles sont leurs pentes possibles. Les pentes sont soit rationnelles soit totalement irrationnelles (argument de Kari). Toutes les pentes rationnelles sont possibles. Quid des pentes totalement irrationnelles ?

Théorème 2 (F.-Sablik, 2012) *Il existe un SFT non vide formé de pavages plans de pente E et d'épaisseur uniformément bornée ssi E est calculable.*

Preuve : construction alambiquée d'un shift sofique à base de pavage de Robinson et de tuiles de Turing. On en dérive un SFT quitte à augmenter l'épaisseur de 1 et à ne pas avoir tous les pavages de la même épaisseur dans le shift (les décorations sont codées par des fluctuations autour du plan).

Définition 4 *L'ombre ijk d'un relevé ou d'une pente est sa projection orthogonale sur l'espace engendré par \vec{e}_i , \vec{e}_j et \vec{e}_k . Cette définition s'étend aux pavages. Les sous-périodes d'un pavage ou d'une pente sont les périodes de ses ombres.*

Théorème 3 (Bédaride-F., 2012) *Il existe un SFT formé de pavages plans de pente E et d'épaisseur uniformément bornée, dont tous ceux d'épaisseur 1, si les sous-périodes entières de E caractérisent un nombre fini de pentes.*

La preuve est géométrique. La réciproque est conjecturée. Pour que l'ensemble des pavages de pente E et d'épaisseur 1 soit lui-même un SFT, il faut au moins que toutes les ombres aient une période (Levitov, 1988).

2.2 Coordonnées grassmanniennes et sous-périodes

Le plan engendré par $(2\sqrt{2}, 1, \sqrt{2}, 1)$ et $(2, \sqrt{2}, 1, \sqrt{2})$ est-il rationnel ? Et celui engendré par $(2, \sqrt{2}, 0, -\sqrt{2})$ et $(0, \sqrt{2}, 2, \sqrt{2})$?

Définition 5 *Les coordonnées grassmanniennes d'un plan de \mathbb{R}^n engendré par (u_1, \dots, u_n) et (v_1, \dots, v_n) sont, renormalisées, les C_n^2 réels $G_{ij} = u_i v_j - u_j v_i$.*

Un résultat classique de géométrie algébrique (démonstration via des mineurs) :

Théorème 4 Des réels (G_{ij}) non tous nuls sont des coordonnées grassmanniennes d'un plan de \mathbb{R}^n ssi ils vérifient les C_n^4 relations suivantes dites de Plücker

$$G_{ij}G_{kl} = G_{ik}G_{jl} - G_{jk}G_{il}.$$

On en déduit par exemple qu'un plan de coordonnées (G_{ij}) est engendré par ²

$$(-G_{12}, 0, G_{23}, G_{24}, \dots, G_{2n}) \quad \text{et} \quad (0, G_{12}, G_{13}, \dots, G_{1n}).$$

Ce qui montre qu'un plan est caractérisé par ses coordonnées grassmanniennes, et qu'il est rationnel ssi ses coordonnées grassmanniennes sont commensurables.

Les exemples de plans ci-dessus ont pour coordonnées grassmanniennes respectives $(2, 0, 2, -1, 0, 1)$ et $(1, \sqrt{2}, 1, 1, \sqrt{2}, 1)$: seul le premier est rationnel.

Les pavages plans permettent de “visualiser” les coordonnées grassmanniennes :

Proposition 2 Les tuiles d'un pavage plan admettent des fréquences données par les valeurs absolues des coordonnées grassmanniennes de sa pente.

Proposition 3 L'ombre ijk d'un pavage plan admet la période (p, q, r) ssi

$$pG_{jk} + rG_{ij} = qG_{ik}.$$

Preuve. L'ombre a pour normale $(G_{jk}, -G_{ik}, G_{ij})$, orthogonale à la période. \square

Les sous-périodes sont forçables par motifs interdits. Plus précisément :

Proposition 4 Il existe un SFT qui contient les pavages plans de pente donnée E et d'épaisseur 1 et qui ne contient que des pavages de mêmes sous-périodes.

Preuve. On force facilement les périodes des ombres par motifs interdits finis. On remonte aux sous-périodes des pavages d'épaisseur 1 grâce à leur quasipériodicité, qui permet de ne pas trop agrandir les motifs interdits. \square

On déduit de ce qui précède que si les sous-périodes d'un plan caractérisent une unique pente E , alors il existe un SFT tel que

- les pavage plans de pente E et d'épaisseur 1 sont dans ce SFT ;
- tout pavage de ce SFT a les mêmes sous-périodes que E ;
- tout pavage plan de ce SFT est de pente E .

On passe facilement au cas d'un nombre fini de pente (deux pentes différentes sont distinguables par un motif assez grand). La partie technique est de montrer que les pavages dans ce SFT sont tous plans et d'épaisseur uniformément bornée. La pente peut être irrationnelle (algébrique) grâce aux relations de Plücker.

2. Si $G_{12} \neq 0$. Sinon, procéder par permutation des indices.

2.3 Pavages de Penrose généralisés

Les pavages par triangles de Penrose (donnés) se factorisent sur des pavages par losanges (les triangles isométriques sont groupés en losanges, les arêtes sont redressées), donnant donc un ensemble sofique. On peut montrer que cet ensemble est en fait de type fini (caractérisé par les 7 façons dont les tuiles s'arrangent autour d'un sommet). Dans quel espace se relèvent les pavages obtenus ? Sont-ils plans ? Si oui, quelle(s) pente(s) ?

Les arêtes des losanges sont définies sur 5 vecteurs : le pavage se relève donc dans \mathbb{R}^5 et a 10 ombres. On vérifie que dans toute *bande* de tout pavage, les losanges d'une même couleur alternent dans deux orientations symétriques. Ceci force la période $\vec{e}_i - \vec{e}_j$ dans chaque ombre ijk avec $2k = i + j$, donc la relation $G_{jk} = G_{ki}$ sur les coordonnées grassmanniennes de sa pente si jamais le pavage est plan. En considérant toutes les bandes, on obtient :

$$G_{12} = G_{51} = G_{45} = G_{34} = G_{23} =: x,$$

$$G_{13} = G_{41} = G_{24} = G_{52} = G_{35} =: y.$$

Injecté dans les $C_5^4 = 5$ relations de Plücker, cela donne l'unique équation

$$xy = x^2 - y^2.$$

Il y a donc deux solutions algébriquement conjugués, l'une étant

$$E = (\varphi, 1, -1, -\varphi, \varphi, 1, -1, \phi, 1, \varphi),$$

où φ est le nombre d'or. On vérifie que E est par exemple engendré par

$$(\cos(2k\pi/5))_{0 \leq k \leq 4} \quad \text{et} \quad (\sin(2k\pi/5))_{0 \leq k \leq 4}.$$

D'après le théorème 3 (partie admise), il n'y a que des pavages plans d'épaisseur uniformément bornée ayant ces pentes (on peut montrer qu'ici l'épaisseur est 1).

Rq : les tuiles de Penrose forcent en fait plus que les sous-périodes : on n'obtient qu'une partie (une classe d'*isomorphisme local*) des pavages plans de pente E . Les pavages plans de pente E sont appelés pavage de Penrose *généralisés*.

2.4 Pavages d’Ammann-Beenker

On veut forcer la pente E engendrée par

$$(\cos(2k\pi/4))_{0 \leq k \leq 3} \quad \text{et} \quad (\sin(2k\pi/4))_{0 \leq k \leq 3}.$$

On calcule les coordonnées grassmanniennes :

$$E = (1, \sqrt{2}, 1, 1, \sqrt{2}, 1).$$

Les sous-périodes donnent

$$G_{12} = G_{14} = G_{23} = G_{34} =: x.$$

Injecté dans l’unique relation de Plücker, on obtient en normalisant à $x = 1$:

$$G_{13}G_{24} = 2.$$

Les sous-périodes caractérisent donc une famille à un paramètre de plan :

$$E_t = (1, t, 1, 1, 2/t, 1).$$

Le théorème 3 ne s’applique donc pas pour $E = E_{\sqrt{2}}$.

Dans ce cas précis, on peut montrer que tout pavage ayant les mêmes sous-périodes entières que E est un pavage plan de pente E_t pour un certain t , et même qu’il est d’épaisseur 1. On peut aussi montrer qu’il n’existe pas de SFT caractérisant E (en montrant que la taille du plus petit motif non commun à E_t et $E_{\sqrt{2}}$ n’est pas bornée quand t tend vers $\sqrt{2}$ – cas particulier de la réciproque conjecturée du théorème 3). En particulier, on ne peut pas forcer $G_{13} = G_{24}$ par motifs interdits (ce qui suffirait à caractériser E). Mais on peut en passant au type sofique (Ammann-Beenker, 1976–92).

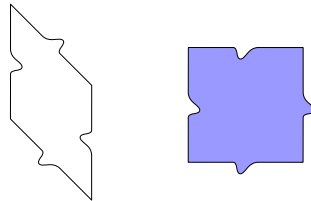


FIGURE 2 – Tuiles qui forment des pavages plans de pente E_t .