CRISTALLOGRAPHIE. — *Classification des systèmes quasi cristallins de type icosaédrique.* Note de **Pierre Cartier,** présentée par Louis Michel.

Les études récentes ([1], [2]) sur les quasi-cristaux de type icosaédrique soulèvent le problème de la classification des systèmes quasi cristallins de ce type. Après une mise au point sur les concepts fondamentaux liés aux quasi-cristaux, nous introduisons la représentation de dimension 6 du groupe de l'icosaèdre déjà considérée par d'autres auteurs. Nous donnons enfin un théorème de classification, qui permet de se ramener à la dimension 6 et d'utiliser dans ce cas les résultats de D. Martinais [3].

*CRYSTALLOGRAPHY.* — Classification of icosahedral quasi-crystals.

*The importance of quasi-crystals of icosahedral type has been recently emphasized by experimentalists [1] as well as theoretical physicists [2]. The question was raised of giving a complete classification for quasi-crystalline systems of icosahedral type. Using a device already used by other authors we introduce a 6-dimensional representation of the icosahedral group* G *and then reduce the classification problem to an enumeration of all* G*-invariant lattices in the 6-space. We then use recent results of D. Martinais* [3] *to the effect that there are, up to scaling, only* 3 *possibilities in the latter case. We end up by describing in some detail the features which may be of interest to experimentalists, especially the various (inverse) length spectra associated to the symmetry axis of the icosahedron.*

1. ANALYSE MATHÉMATIQUE DES EXPÉRIENCES DE DIFFRACTION DANS LES QUASI-CRISTAUX. — Notons $E_3$ l'espace physique, *espace direct* de la cristallographie. On choisit une origine O dans $E_3$, et l'on ne fait pas de différence entre le point *a* et le vecteur $\overrightarrow{Oa}$. Le dual $\Theta$ de $E_3$ est *l'espace inverse*; un élément $\mathbf{k}$ de $\mathbf{\Theta}$ est une application linéaire de $E_3$ dans l'ensemble $\mathbf{R}$ des nombres réels, dont la valeur en un point $\mathbf{x}$ de $E_3$ se note $\mathbf{k}.\mathbf{x}$. Le produit scalaire $\mathbf{k}.\mathbf{x}$ est un nombre pur, sans dimension; la longueur d'un vecteur $\mathbf{x}$ dans $E_3$ sera mesurée en nanomètres (nm), et celle des vecteurs de $\mathbf{\Theta}$ en $nm^{-1}$.

Considérons d'abord un *cristal*, et soit L le *réseau* correspondant. Les lois de la diffraction des rayons X par les cristaux (Laue, Bragg) se formulent aisément au moyen du réseau dual $L^*$ de L. Par définition, il existe des bases $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ pour $E_3$, et $\mathbf{e}_1^*$, $\mathbf{e}_2^*$, $\mathbf{e}_3^*$ pour $\Theta$, en dualité ($\mathbf{e}_i.\mathbf{e}_j^*$ est égal au symbole de Kronecker $\delta_{ij}$); le réseau L dans $E_3$ se compose des vecteurs à coordonnées entières par rapport à la base $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$, et $L^*$ a la relation analogue à la base $\mathbf{e}_1^*$, $\mathbf{e}_2^*$, $\mathbf{e}_3^*$. Supposons que le faisceau incident de rayons X soit monochromatique et parallèle à une droite D. Soit P le plan perpendiculaire à la direction D, vu comme sous-espace vectoriel de $\Theta$. Lorsque $P \cap L^*$ est un réseau dans le plan P, l'image de diffraction s'observe dans un plan de direction P, et les pics de Bragg correspondent aux points de $P \cap L^*$. En faisant varier la direction D, on peut en principe explorer tout le réseau $L^*$.

La formulation précédente se transporte telle quelle au cas des *quasi-cristaux*, pourvu que l'on remplace le réseau L par un *quasi-réseau* $\Lambda$ dans $\mathbf{\Theta}$. Suivant les idées de Janner [4], la notion de quasi-réseau dans un espace de dimension 3 se ramène à celle de réseau dans un espace de dimension plus grande. On peut en effet supposer que $E_3$ est plongé dans un espace vectoriel $F_N$ de dimension $N \geqq 3$, et qu'on s'est donné un réseau L dans $F_N$ qui satisfait au postulat suivant :

(J) *La projection* $\pi$ *applique le réseau* $L^*$ *de* $E_N^*$, *dual du réseau* L *de* $F_N$, *sur le quasi-réseau* $\Lambda$ *de* $\mathbf{\Theta}$, *de sorte que tout vecteur de* $\Lambda$ *provienne d'un unique vecteur de* $L^*$.

Nous ne détaillerons pas la construction de $F_N$ et de L, nous contentant d'affirmer que le postulat (J) détermine ces objets de manière essentiellement unique. Notons que $E_N^*$ est l'espace dual de $F_N$ et que la projection $\pi$ de $E_N^*$ sur $\mathbf{\Theta}$ satisfait à la propriété

0249-6305/87/03040789 $ 2.00 

caractéristique $\mathbf{x}.\mathbf{k}=\mathbf{x}.\pi(\mathbf{k})$ pour $\mathbf{x}$ dans $E_3$ et $\mathbf{k}$ dans $E_N^*$. Dans le cas d'un cristal, on aurait $N=3$, $E_3=F_N$, $\Theta=E_N^*$, $L^*=\Lambda$ et $\pi(\mathbf{k})=\mathbf{k}$ pour tout $\mathbf{k}$ dans $\Theta$.

Choisissons deux bases en dualité $\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_N$ pour $F_N$ et $\mathbf{k}_1^*, \ldots, \mathbf{k}_N^*$ pour $E_N^*$, de sorte que L et L* se composent des vecteurs à coordonnées entières dans leurs espaces respectifs. Si l'on pose $\mathbf{k}_1=\pi(\mathbf{k}_1^*), \ldots, \mathbf{k}_N=\pi(\mathbf{k}_N^*)$, le quasi-réseau $\Lambda$ se compose des vecteurs $m_1\mathbf{k}_1+\ldots+m_N\mathbf{k}_N$, où $m_1, \ldots, m_N$ parcourent indépendamment l'ensemble des entiers (positifs ou négatifs).

L'*intensité* des pics de Bragg est liée à l'analyse de Fourier. Il existe sur $E_3$ une fonction scalaire $h(\mathbf{x})$, essentiellement une densité électronique, quasi périodique au sens de Bohr [5], dont le spectre est contenu dans $\Lambda$. Elle admet le développement

$$(1)\qquad h(\mathbf{x})=\sum_{m_1,\ldots,m_N} c(m_1,\ldots,m_N)\,\mathbf{e}((m_1\mathbf{k}_1+\ldots+m_N\mathbf{k}_N).\mathbf{x})$$

avec l'abréviation $\mathbf{e}(t)=e^{2\pi i t}$. Il existe sur l'espace $F_N$ une unique fonction continue $H(\mathbf{y})$ qui coïncide avec $h(\mathbf{x})$ sur $E_3$ et admette L pour réseau de périodes; elle est définie sur le sous-ensemble *dense* $E_3+L$ par $H(\mathbf{x}+\xi)=h(\mathbf{x})$ et elle admet le développement en série de Fourier

$$(2)\qquad H(\mathbf{y})=\sum_{m_1,\ldots,m_N} c(m_1,\ldots,m_N)\,\mathbf{e}((m_1\mathbf{k}_1^*+\ldots+m_N\mathbf{k}_N^*).\mathbf{y}).$$

Bien entendu, $H(\mathbf{y})$ est déterminée par ses valeurs sur le domaine fondamental de L dans $F_N$ constitué des vecteurs $t_1\mathbf{e}_1+\ldots+t_N\mathbf{e}_N$ avec $t_1, \ldots, t_N$ compris entre 0 et 1. *L'intensité du pic de Bragg indexé par le vecteur* $\mathbf{k}=m_1\mathbf{k}_1+\ldots+m_N\mathbf{k}_N$ *de* $\Lambda$ *est proportionnelle à* $|c_{\mathbf{k}}|^2$, *avec* $c_{\mathbf{k}}=c(m_1,\ldots,m_N)$.

Supposons maintenant que L soit le réseau des translations correspondant à un groupe cristallographique $\mathscr{G}$ dans l'espace $F_N$; soit $G=\mathscr{G}/L$ le groupe ponctuel associé à $\mathscr{G}$. On suppose que tout élément de $\mathscr{G}$ transforme $E_3$ en un 3-plan parallèle dans $F_N$. Alors on a des représentations linéaires de G dans les espaces $E_3$, $F_N$, $\Theta$ et $E_N^*$, conservant tous les produits scalaires en jeu; de plus, les réseaux L et L* sont stables par G, donc aussi le quasi-réseau $\Lambda$. Si le quasi-cristal considéré admet le groupe $\mathscr{G}$ de symétries, on a en particulier $H(\gamma(\mathbf{y}))=H(\mathbf{y})$ pour $\gamma$ dans $\mathscr{G}$ et $\mathbf{y}$ dans $F_N$, d'où la relation

$$(3)\qquad c_{\mathbf{k}}=c_{g(\mathbf{k})}\,.\,\mathbf{e}(g(\varkappa)\,.\,\mathbf{a}_g)\qquad(\mathbf{k}\text{ dans }\Lambda)$$

en représentant la transformation $\gamma$ sous la forme $\gamma(\mathbf{x})=g(\mathbf{x})+\mathbf{a}_g$ avec un vecteur $\mathbf{a}_g$ de $F_N$, et en notant $\varkappa$ l'unique vecteur de L* tel que $\pi(\varkappa)=\mathbf{k}$. En particulier, on a $|c_{\mathbf{k}}|^2=|c_{g(\mathbf{k})}|^2$ et *l'on peut définir le groupe ponctuel comme l'ensemble des transformations orthogonales de* $E_3$ *autour de* O *qui laissent invariante la figure des pics de Bragg, compte tenu des intensités. Lorsque l'on saura faire de l'holographie aux rayons* X, *on pourra déterminer les phases des coefficients* $c_{\mathbf{k}}$ *et utiliser la formule* (3) *pour la détermination du groupe spatial* $\mathscr{G}$.

2. Géométrie de l'icosaèdre [6]. — Soit I un icosaèdre régulier, de centre O, d'arête égale à $2l$; il sera commode de rapporter toutes les longueurs à $l$. Il existe 5 octaèdres réguliers $P_1, \ldots, P_5$ dont les $5\times 6$ sommets soient les milieux des arêtes de I. On choisit une base orthogonale $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ de $E_3$, formée de vecteurs de longueur $l$, et telle que les sommets de $P_1$ soient $\pm\tau\mathbf{e}_1, \pm\tau\mathbf{e}_2, \pm\tau\mathbf{e}_3$ [on pose $\tau=(\sqrt{5}+1)/2$]. Notons $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_6$ les vecteurs dont les coordonnées par rapport à la base précédente sont données par les

colonnes de la matrice $\begin{pmatrix} 0 & 1 & \tau & \tau & 0 & -1 \\ \tau & 0 & 1 & -1 & \tau & 0 \\ 1 & \tau & 0 & 0 & -1 & \tau \end{pmatrix}$; les sommets de l'icosaèdre I sont $\pm\mathbf{a}_1, \ldots, \pm\mathbf{a}_6$.

On plonge $E_3$ dans un espace euclidien $F_6$ de dimension 6, somme directe orthogonale de $E_3$ et d'une copie $E'_3$ de $E_3$. On note $\mathbf{e}'_i$ le vecteur de $E'_3$ image de $\mathbf{e}_i$; alors $\mathbf{e}'_1$, $\mathbf{e}'_2$, $\mathbf{e}'_3$ est une base orthogonale de $E'_3$ formée de vecteurs de longueur $l$. Avec les conventions usuelles, le corps $\mathbf{Q}(\sqrt{5})$ se compose des nombres de la forme $c=a+b\sqrt{5}$ avec $a$ et $b$ rationnels; le *conjugué* $c'$ de $c$ est le nombre $a-b\sqrt{5}$ et réciproquement, $c$ est le conjugué de $c'$. En particulier, on a $\tau+\tau'=1$ et $\tau\tau'=-1$. Le conjugué d'un vecteur $\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{3} x_i\mathbf{e}_i$ de $E_3$ à coordonnées dans $\mathbf{Q}(\sqrt{5})$ est le vecteur $\mathbf{x}'=\sum_{i=1}^{3} x'_i\mathbf{e}'_i$ de $E'_3$, et inversement $\mathbf{x}'$ est le conjugué de $\mathbf{x}$. Si $\mathbf{y}'$ est le conjugué dans $E'_3$ d'un vecteur $\mathbf{y}$ de $E_3$ à coordonnées dans $\mathbf{Q}(\sqrt{5})$, les nombres $\mathbf{x}.\mathbf{y}/l^2$ et $\mathbf{x}'.\mathbf{y}'/l^2$ sont conjugués dans $\mathbf{Q}(\sqrt{5})$.

En plus de l'icosaèdre convexe I, de symbole de Schläfli $\{3,5\}$, on introduit l'icosaèdre étoilé J, de symbole de Schläfli $\{3, 5/2\}$, ayant mêmes sommets que I. Les vecteurs de la forme $\tau\mathbf{a}'$, où $\mathbf{a}$ parcourt l'ensemble des sommets de I (et de J), sont les sommets d'un icosaèdre convexe I′ et d'un icosaèdre étoilé J′ dans $E'_3$, de mêmes dimensions que I.

Posons $\mathbf{b}_i=\mathbf{a}_i+\tau\mathbf{a}'_i\ (1\leqq i\leqq 6)$. Les vecteurs $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_6$ ont la même longueur $l.\sqrt{5+\sqrt{5}}$ et forment une base orthogonale de $F_6$. Notons C le polytope convexe de sommets $\pm\mathbf{b}_1, \ldots, \pm\mathbf{b}_6$ dans $F_6$ (« cross polytope » de [6]). Il se projette sur I dans $E_3$ et sur I′ dans $E'_3$; ses 60 arêtes se répartissent en deux familles de 30 qui se projettent respectivement sur les arêtes de I et J′ et sur les arêtes de I′ et J.

3. La représentation de dimension 6 du groupe de l'icosaèdre. — Le groupe G de l'icosaèdre se compose des rotations autour de O dans $E_3$ qui permutent les 12 sommets de I; c'est aussi l'ensemble des permutations paires des 5 octaèdres $P_1, \ldots, P_5$. Pour tout élément $g$ de G, il existe une rotation $g'$ dans $E'_3$ telle que l'on ait $g'(\mathbf{x}')=g(\mathbf{x})'$ pour tout vecteur $\mathbf{x}$ de $R_3$ à coordonnées dans $\mathbf{Q}(\sqrt{5})$. Le groupe G agit ainsi dans les espaces $E_3$ et $E'_3$ par des représentations linéaires qu'on notera $\mathcal{D}_3$ et $\mathcal{D}'_3$, et sur l'espace $F_6$ par la représentation $\mathcal{D}_3+\mathcal{D}'_3$.

Dans l'espace $F_6$ introduisons les 3 réseaux cubiques associés au repère orthonormé $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_6$ : le réseau $L_1$ se compose des vecteurs à coordonnées entières dans cette base, on ajoute les centres des cubes pour obtenir $L_2$ et les centres de toutes les faces de dimension paire pour $L_3$. Le groupe de l'icosaèdre se réalise comme l'ensemble des transformations linéaires dans $F_6$ qui laissent stable chacun des sous-espaces $E_3$ et $E'_3$, et aussi le réseau $L_1$; les autres réseaux $L_2$ et $L_3$ sont également stables par G. Si $u$ et $v$ sont deux nombres réels non nuls, on note $h(u, v)$ le changement d'échelle qui multiplie par $u$ les vecteurs de $E_3$ et par $v$ ceux de $E'_3$; on pose en particulier $\eta=h(\tau, \tau')$. Les réseaux $L_2$ et $L_3$ sont stables par $\eta$; par contre, $\eta$ permute circulairement $L_1$ et deux autres réseaux $L'_1$ et $L''_1$, et l'on a $L_2=L_1\cup L'_1\cup L''_1$.

Dominique Martinais a démontré [3] que *les réseaux dans* $F_6$ *stables par* G *sont les images par les changements d'échelle* $h(u, v)$ *des réseaux* $L_1$, $L_2$ *et* $L_3$.

On peut déduire de là une description des quasi-réseaux de rang 6 invariants par le groupe G dans l'espace inverse $\Theta$. On considère un icosaèdre I* dans $\Theta$, dont l'arête est de longueur $2q$ (exprimée par exemple en $\mathrm{nm}^{-1}$), et dont les sommets sont numérotés sous la forme $\pm\mathbf{a}_1, \ldots, \pm\mathbf{a}_6$ comme au n° 2. Alors le quasi-réseau $\Lambda_1$ a pour base $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_6$, le quasi-réseau $\Lambda_2$ est réunion de $\Lambda_1$, $\tau\Lambda_1$ (homothétique de $\Lambda_1$ dans le rapport $\tau$) et $\tau^2\Lambda_1$; enfin, on pose $\Lambda_3=\Lambda_1 \cap \tau\Lambda_1$. Pour les observations, il est important de remarquer que l'on ne change pas $\Lambda_2$ et $\Lambda_3$ si l'on multiplie $q$ par une puissance de $\tau$ (remarque analogue avec $\Lambda_1$ et $\tau^3$); *la figure de diffraction ne permet pas à elle seule de fixer l'échelle* $q$, il faut tenir compte d'autres informations, par exemple l'intensité des pics de Bragg.

Pour distinguer les 3 cas précédents, on introduira des axes de symétrie $D_2$, $D_3$ et $D_5$ de l'icosaèdre I*; si le faisceau incident est parallèle à l'un des axes d'ordre 2 de I*, on pourra prendre $D_2$, $D_3$ et $D_5$ dans le plan d'observation P (deux axes de symétrie $D'_m$ et $D''_m$ du même ordre $m$ sont conjugués par le groupe G). Le tableau suivant donne, pour chaque quasi-réseau $\Lambda_j$ et chaque axe de symétrie $D_k$ la distance au centre de la figure de diffraction des pics de Bragg sur l'axe en question; les indices $m$ et $n$ sont des entiers arbitraires.

| | $D_2$ | $D_3$ | $D_5$ |
|---|---|---|---|
| $\Lambda_1$ . . | $q_2(m+n\tau)$ | $q_3(m+2n\tau)$ | $q_5(m+2n\tau)$ |
| $\Lambda_2$ . . | $q_2(m+n\tau)$ | $q_3(m+n\tau)$ | $q_5(m+n\tau)$ |
| $\Lambda_3$ . . . . . . . . . . | $q_2(m+n\tau)$ | $q_3(2m+2n\tau)$ | $q_5(2m+2n\tau)$ |

On a posé $q_2=2q$, $q_3=q(\sqrt{15}-\sqrt{3})/2$ et $q_5=q((5+\sqrt{5})/2)^{1/2}$.

4. Généralisation. — Revenons à la situation du n° 1. *L'espace euclidien* $E_3$ *est plongé dans un espace* $F_N$ *de dimension* N, *l'action du groupe* G *s'étend en une représentation linéaire* $\mathscr{D}$ *dans l'espace* $F_N$ *et l'on dispose d'un réseau* L *dans* $F_N$, *stable par* G *et tel que* $E_3+L$ *soit dense dans* $F_N$.

Énonçons le théorème de classification :

(A) *La dimension est multiple de* 6, *soit* $N=6d$.

(B) *La représentation* $\mathscr{D}$ *de* G *est égale à* $d.\mathscr{D}_3+d.\mathscr{D}'_3$.

On peut donc identifier $F_N$ au produit $F_6^{(1)}\times\ldots\times F_6^{(d)}$ de $d$ copies de $F_6$, en respectant l'action du groupe G. On peut même s'arranger pour satisfaire à la condition suivante :

(C) *Le réseau* L *est de la forme* $L^{(1)}\times\ldots\times L^{(d)}$, *où* $L^{(i)}$ *est un réseau dans* $F_6^{(i)}$, *invariant par* G.

Le spectre de diffraction correspondant (quasi-cristaux modulés?) se décrit ainsi : on introduit des icosaèdres $I_1^*, \ldots, I_d^*$, de demi-arêtes respectives $q^{(1)}, \ldots, q^{(d)}$, et pour chaque icosaèdre $I_j^*$ un quasi-réseau $\Lambda^{(j)}$ de l'un des 3 types décrits au n° 3. Les pics de Bragg (dans un plan donné, ou dans une direction donnée) sont alors indexés sous la forme $\mathbf{k}^{(1)}+\ldots+\mathbf{k}^{(d)}$, où $\mathbf{k}^{(j)}$ se réfère à $\Lambda^{(j)}$.

Reçue le 16 février 1987.

Références bibliographiques

[1] D. Schechtman, I. Blech, D. Gratias et J. N. Cahn, *Phys. Rev. Lett.*, 83, 1984, p. 1953.

[2] A. Katz et M. Duneau, *J. Physique*, 47, 1986, p. 181-196.

[3] D. Martinais, *Comptes rendus*, 304, série II, 1987 (à paraître).

[4] A. Janner et T. Janssen, *Helv. Phys. Acta*, 56, 1983, p. 665-675.

[5] H. Bohr, *Fastperiodische Funktionen*, *Erg. der Math.*, 5, 1932, Springer.

[6] H. S. M. Coxeter, *Regular polytopes*, 1963, MacMillan.

*Centre de Mathématiques, École Polytechnique*, 91128 *Palaiseau Cedex*.