QUASIKRISTALLE UND PISOT-ZAHLEN

MARTIN SCHLICHENMAIER

Dezember 96, Manuskripte Nr. 221

Mannheimer Manuskripte 221

Dezember 96

Quasikristalle und Pisot-Zahlen

von Martin Schlichenmaier[1]

Wenn man von Kristallen redet, sollte man sich diese auch anschauen. Lassen Sie mich deshalb mit einigen Bildern beginnen. Die wenigsten Menschen werden sich dem Reiz kristallisierter Materialien entziehen können. Bild 1 zeigt Bergkristalle. Hierbei handelt es sich um kristallisiertes Siliziumdioxid. Ein Charakteristikum von Kristallen ist ihr regelmäßiger (äußerer) Aufbau und die Richtungsabhängigkeit ihrer physikalischen Eigenschaften. Dies wird hervorgerufen durch den regelmäßigen inneren Aufbau. Kristalle entstehen durch periodisches Aneinanderheften von *Elementarzellen.* Man sagt auch: Kristalle haben eine *Gitterstruktur.* Das Postulat der Festkörperphysiker und Kristallographen war, daß ein Festkörper entweder ein Kristall ist oder vollkommen irregulär aufgebaut ist. Die vollkommen irregulären Materialen nennt man amorphe Körper oder Gläser.

Eine Bewegung im Raum, welche einen Körper wieder in sich überführt, nennt man eine Symmetrie des Körpers. Dieses "In sich überführen" soll so verstanden werden, daß die einzelnen Punkte, welche zum Körper gehören, zwar bewegt werden können, aber der Körper als Form (d.h. als Menge) gleich bleibt. Stellt man sich einen Kristall in alle drei Raumrichtungen unendlich ausgedehnt vor, so besitzt er eine Translationssymmetrie unter ganzzahligen Vielfachen dreier unabhängiger Raumrichtungen. Neben der Translationssymmetrie besitzen Kristalle auch Drehachsen als Symmetrieelemente (Ro-

---

Dieser Text ist die leicht vervollständigte schriftliche Fassung eines von mir im Dezember 1996 an der Universität Mannheim gehaltenen Vortrags

[1]Universität Mannheim, Fakultät für Mathematik und Informatik, 68131 Mannheim, Germany, schlichenmaier@math.uni-mannheim.de

tationssymmetrie). Die immer vorhandene Translationssymmetrie erzwingt jedoch wesentliche Einschränkungen über die Zähligkeit solcher Drehachsen. Die Zähligkeit einer Drehachse gibt an, nach wieviel einzelnen Drehungen man genau eine volle Umdrehung ausführte. Erlaubt sind in der zweidimensionalen Ebene und dem dreidimensionalen Raum lediglich 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehachsen. Dies werde ich weiter unten zeigen. Ich habe Ihnen hier eine Pyritkristallstufe mitgebracht. Es handelt sich um Kristalle, die Pentagone (Fünfecke) als Begrenzungsflächen besitzen. Scheinbar besitzen diese Pyritkristalle somit 5-zählige Rotationssymmetrie. Allerdings erweisen sich die Pentagone bei näherer Inspektion als verzerrt. Tatsächlich liegt keine 5-zählige Rotationssymmetrie vor.

Das äußere Aussehen eines Kristalls kann sehr verwirrend sein. Darüberhinaus: Zermahlen wir einen Kristall, so ändern wir seinen inneren Aufbau nicht. Der erhaltenene Sand bleibt weiterhin kristallisierte Materie. Die obigen schönen Bergkristalle ergeben profanen Quarzsand. Wie findet man den inneren Aufbau und wie kann man Kristalle von Gläsern unterscheiden? Schickt man Licht durch einen durchsichtigen Kristall, so erscheint er vollkommen homogen. Man sieht keine innere Struktur. Die Wellenlänge von Licht ist viel zu groß, um die einzelnen Bausteine zu sehen. Erst wenn man zu kurzwelligeren Strahlen, etwa zu Röntgenstrahlen, deren Wellenlänge im selben Größenbereich wie die Abstände der Bausteine liegt, übergeht, treten Effekte auf, aus denen man auf die innere Struktur schließen kann. Die Röntgenstrahlen werden an den Bausteinen gestreut und die gestreuten Strahlen addieren sich zu einem *Beugungsbild*, das beobachtet werden kann. Mathematisch werden die Beugungsbilder durch die Fouriertransformierte der *Belegungsdichtefunktion* festgelegt. Besitzt das durchleuchtete Material eine Gitterstruktur, so gilt dies auch für das Beugungsbild. Auf Bild 2 sind einige zweidimenensionale Gitter und die zugehörigen Beugungsbilder[2] zu sehen. Insbesondere können damit Kristalle lediglich Beugungsbilder mit 2-, 3-, 4- oder 6-zähligen Drehsymmetrien haben.

Die Festkörperphysiker, Kristallographen und Materialwissenschaftler waren bis **1984** mehrheitlich der Überzeugung, daß ein Beugungsbild entweder aus einem Netz heller Flecken besteht und dann ein Kristall vorliegt oder eine kontinuierliche Helligkeitsverteilung besitzt und es sich dann um ein amorphes Material handelt. Überlegungen,

[2]Im Beugungsbild fällt die Intensität radial von der Untersuchungsrichtung ausgehend ab. D.h. die weit außen liegenden Punkte des Beugungsgitters sind nicht mehr sichtbar.

die aperiodischen Pflasterungen der Ebene von Penrose in Verbindung mit der Struktur von Festkörpern zu bringen, wurden von den meisten als theoretische Spielereien betrachtet. Als Sensation kam dann 1984 die Tatsache, daß Shechtman, Blech, Gratias und Cahn eine Legierung aus Aluminium (Al) mit 14 % Mangan (Mn) durch schnelles Abkühlen in einen stabilen Zustand versetzen konnten, der eine 10-zählige Symmetrie im Beugungsgitter besitzt. Genauer konnten sie zeigen, daß eine ikosaedrische Raumsymmetrie vorliegt[3]. Bild 3 zeigt den relevanten Ausschnitt aus der Orginalarbeit. Das entscheidende Beugungsbild wird in Bild 4 nochmals vergrößert dargestellt[4]. Nachdem alle anderweitigen Erklärungsmuster ausgeschieden wurden, wurden die *Quasikristalle* als eine neue Klasse von Festkörpern eingeführt. Die obige Al-Mn-Legierung ist ein Quasikristall.

In der Zwischenzeit wurden massenhaft Legierungen erzeugt, die verbotene Symmetrien im diskreten Beugungsbild besitzen, also Quasikristalle sind. Es handelt sich hierbei um Legierungen mit 8-, 10- oder 12-zähligen Symmetrien in der Ebene und Periodizität in die dritte Richtung oder um Legierungen mit ikosaedrischer Symmetrie im Raum. Bild 5 zeigt "Ikosaederblumen". Handelte es sich zu Beginn noch um "Kristalle" im μm-Bereich, so werden heute "Kristalle" im cm-Bereich erzeugt (meist Al-Li-Cu- bzw. Al-Cu-Fe-Legierungen).

Was hat die Mathematik hierzu zu sagen?

Wie bereits erwähnt, besitzt ein Kristall eine unendliche Translationssymmetrie in drei unabhängige Richtungen des Raumes. Verschoben wird jeweils um ganzzahlige Vielfache der Basisverschiebungsvektoren. Dies kann man mit der folgenden mathematischen Definition fassen, die ich gleich für beliebige Raumdimensionen geben möchte.

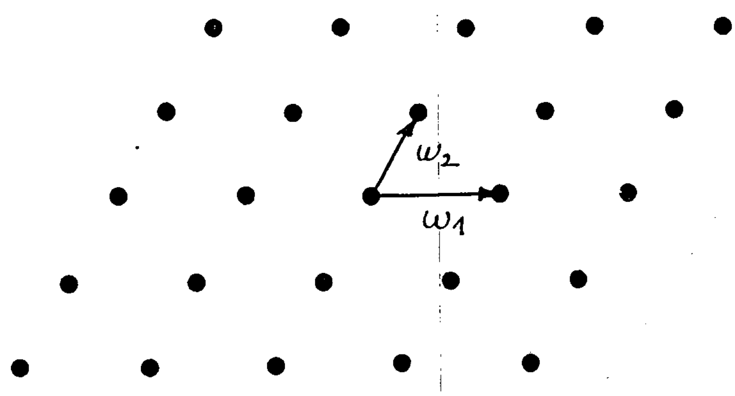
---

[3]Der Ikosaeder ist der reguläre platonische Körper, der aufgebaut ist aus 20 gleichen Dreiecksflächen und 12 Ecken. Sein dualer platonischer Körper, d.h. der Körper, der entsteht, indem man die Flächenmittelpunkte als Ecken wählt, ist der Dodekaeder, der 12 reguläre Pentagone (Fünfecke) als Begrenzungsflächen besitzt. Die Ikosaedersymmetrie besteht aus den Drehungen des Raums, die den Körper (als Menge) wieder in sich überführt. Da diese 5-zählige Symmetrieelemente enthält, kann sie nicht als Symmetrie bei Kristallen auftreten.

[4]Das Beugungsbild besitzt eine 10-zählige Symmetrie. Dies hängt damit zusammen, daß das Beugungsbild nur das Quadrat des Betrags der Fouriertransformierten der Belegungsdichte wiedergibt. Es ist deshalb immer invariant unter der Spiegelung am Ursprung. Durch diese Spiegelung wird aus einer 5-zähligen Symmetrie eine 10-zähligen Symmetrie.

Definition. Eine Untergruppe L von $(\mathbb{R}^n, +)$ heißt *Gitter*, falls es n linear unabhängige Vektoren $w_1, w_2, \ldots, w_n \in \mathbb{R}^n$ gibt mit

$$L = \{ \sum_{i=1}^{n} m_i w_i \mid m_i \in \mathbb{Z},\ i = 1, \ldots, n \} . \quad \square$$



1. Ein Gitter in der Ebene

Beachten Sie:

(1) Es gibt einen minimalen Abstand zwischen den Gitterpunkten (L ist diskret in einem starken Sinne).

(2) Man kann um jeden Punkt x des $\mathbb{R}^n$ eine Kugel legen, die höchstens einen Gitterpunkt enthält. Es gibt sogar einen Radius der Kugeln, der für alle Punkte gleichzeitig gewählt werden kann.

(3) Das Gitter ist gleichmäßig ins Unendliche ausgedehnt.

Das von den Basisvektoren des Gitters aufgespannte Parallelotop nennt man die *Elementarzelle* E des Gitters, bzw. des Kristalls[5]. Also

$$E = \{ \sum_{i=1}^{n} \alpha_i w_i \mid \alpha_i \in \mathbb{R},\ 0 \le \alpha_i \le 1,\ i = 1, \ldots, n \} .$$

Der ganze (mathematische) Kristall wird durch Aneinanderfügen solcher Elementarzellen aufgebaut. Reale Kristalle enden natürlich irgendwann. Wenn ich von mathematischen Kristallen rede, so sei dieser Anfügungsprozeß beliebig fortgesetzt. Kennt man

[5] Beachten Sie, daß die Elementarzelle von der gewählten Basis abhängt.

den Kristall innerhalb einer Elementarzelle, so kennt man ihn als Ganzes. Befindet sich etwa bei $a \in E$ ein Atom eines festen Typs, so muß an den Punkten der Menge

$$a + L \ := \ \{a + w \in \mathbb{R}^n \mid w \in L\}$$

sich jeweils auch ein Atom dieses Typs befinden. Dies gilt auch umgekehrt. Die Menge $a + L$ nennt man die Bahn des Punktes a unter dem Gitter L. In der Elementarzelle können nur endlich viele Atome liegen. Dies bedeutet aber, daß ein Kristall nur aus endlich vielen Bahnen unter dem Gitter L bestehen kann.

Definition. Eine Teilmenge K des $\mathbb{R}^n$ heißt *(mathematischer) Kristall*[6] falls es ein Gitter L gibt derart, daß K eine Vereinigung endlich vieler Bahnen des Gitters L ist. L heißt *Translationsgitter* des Kristalls K. □

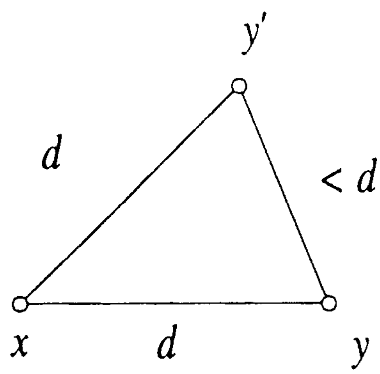
Genau wie L ist auch K eine diskrete Teilmenge. Die obigen Aussagen über die Kugeln um die Punkte von $\mathbb{R}^n$ in Bezug auf ein Gitter gelten ebenso in Bezug auf einen Kristall.

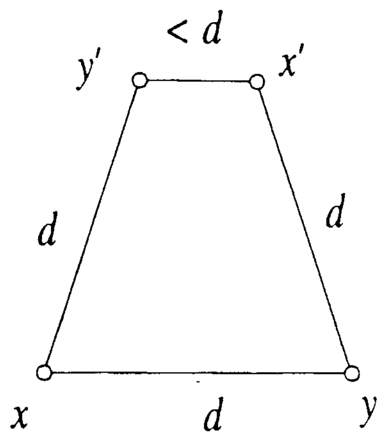
Proposition. *Ein Kristall im zwei- oder dreidimensionalen Raum besitzt höchstens 2-, 3-, 4- oder 6-zählige Drehachsen.*

Beweis. Dies möchte ich hier elementargeometisch für den zweidimensionalen Fall beweisen. Die dreidimensionale Aussage folgt dann aus der Tatsache, daß im Dreidimensionalen der Raum von der Drehachse und der dazu orthogonalen Ebene, in der gedreht wird, aufgespannt wird. Sei $x \in \mathbb{R}^2$ ein Punkt mit einer n-zähligen Drehsymmetrie. Wegen der Translationssymmetrie bilden die Punkte mit n-zähliger Symmetrie eine unendliche Menge. Da wieder alles aus der Elementarzelle heraus festgelegt ist, bilden sie eine diskrete Teilmenge und es gibt einen minimalen Abstand zwischen ihren Punkten. Seien x und y Punkte mit n-zähliger Symmetrie und minimalem Abstand d. Eine n-zählige Symmetrie um x bedeutet, daß man die Punktmenge K um $\alpha = \frac{2\pi}{n}$ rotieren kann und K zurückerhält. Insbesondere besitzt der Punkt y', der durch Rotation von y um x mit dem Winkel α erhalten wird, ebenfalls eine n-zählige Rotationssymmetrie. Die Punkte x, y, y' bilden ein gleichschenkliges Dreieck mit Schenkellänge d. Ist nun

[6] In der modernen Terminologie der Kristallographen handelt es sich hierbei um einen periodischen Kristall.

$n > 6$, d.h. $\alpha < 60°$, so ist die Distanz $|y - y'| < d$ im Widerspruch zur Minimalwahl von x und y. Um den Fall $n = 5$ auszuschließen, rotieren wir y um x und erhalten einen Punkt y' der ebenfalls 5-zählige Symmetrie hat. Rotieren wir den Punkt x um y mit dem Winkel $4 \cdot \frac{2\pi}{5} = -\frac{2\pi}{5}$, so erhalten wir ebenso einen Punkt x' mit 5-zähliger Symmetrie. Das Ausrechnen der Abstände zeigt: $|x' - y'| < |x - y| = d$, also wiederum ein Widerspruch zur Minimalwahl. □





2. Zum Beweis der Proposition

Soviel zu den Kristallen. Quasikristalle sollen diskrete Mengen sein, die "im Wesentlichen" diskrete Beugungsgitter erzeugen.

Definition. Eine Teilmenge $D \subseteq \mathbb{R}^n$, heißt *Delone-Menge*, falls es Zahlen $R > r > 0$ gibt derart, daß für alle Punkte $x \in \mathbb{R}^n$ gilt:

(1) Die Kugel $K_r(x)$ mit Radius r und Mittelpunkt x trifft D höchstens einmal.

(2) Die Kugel $K_R(x)$ mit Radius R und Mittelpunkt x trifft D mindestens einmal. □

Kristalle sind offensichtlich Delone-Mengen. Allgemeine Delone-Mengen sind allerdings noch zu beliebig. Wir müssen weiter einschränken. Es sei an die folgende Definition erinnert. Sind A und B zwei Teilmengen von $\mathbb{R}^n$, so versteht man unter der Summe bzw. der Differenz die folgenden Teilmengen

$$A + B := \{\, a + b \mid a \in A,\ b \in B \,\} \qquad \text{bzw.} \qquad A - B := \{\, a - b \mid a \in A,\ b \in B \,\} .$$

Die Untergruppeneigenschaft eines Gitters kann man äquivalent durch die Eigenschaft $L - L \subseteq L$ beschreiben. Es gilt: Eine Teilmenge L von $\mathbb{R}^n$ ist ein Gitter, falls L eine Delone-Menge ist und $L - L \subseteq L$ erfüllt ist. Dies schwächt man nun in der folgenden Weise ab.

Definition. Eine Teilmenge Q von $\mathbb{R}^n$ heißt *Quasikristall (vom endlichen Typ)* falls gilt:

(1) Q ist eine Delone-Menge.

(2) Es existiert eine endliche Teilmenge $F \subseteq \mathbb{R}^n$ mit

$$Q - Q \quad \subseteq \quad Q + F\,. \quad \square$$

Diese Definition stammt von Meyer [Mey]. Es gibt andere Definitionen, die leider nicht alle zur obigen äquivalent sind. Aus der Definition erkennt man sofort, daß jeder Kristall auch ein Quasikristall ist.

Wie erzeugt man mathematisch Quasikristalle?

Wer bereits über Quasikristalle informiert ist, kennt sicher die *Schneide- und Projiziere-Methode* um Quasikristalle zu erzeugen. Hierbei wird der Quasikristall erzeugt, indem man einen gewissen Ausschnitt eines Gitters aus einem höherdimensionalen Raum in eine niedrigere Dimension projiziert. Eine weitere bekannte Methode ist die Erzeugung via *Substitutionsregeln.* Hier möchte ich aber den zweiten Begriff aus dem Titel aufgreifen und eine relativ neue, intrinsische Erzeugung innerhalb des Raumes $\mathbb{R}^n$ selbst mit Hilfe von Pisot-Zahlen vorstellen. Dieser Zugang geht zurück auf Berman, Gazeau, Meyer, Moody und Patera [BM],[Mey],[Gaz][MP][Pa]. Bei dieser Konstruktion ist man in der Lage die Symmetrien sofort einzubauen.

Definition. Eine reelle Zahl θ heißt *Pisotzahl*[7] falls gilt:

(1) θ ist eine algebraisch ganze Zahl und ist gößer als 1,

(2) für alle weiteren algebraisch Konjugierten $\theta_2, \theta_3, \ldots, \theta_r$ gilt $|\theta_i| < 1$. $\square$

[7] manchmal auch Pisot-Vijayvaraghavan-Zahl (PV-Zahl) genannt

Lassen Sie mich diese Begriffe kurz in ihre Erinnerung zurückrufen. Eine (komplexe) Zahl θ heißt *algebraisch ganz,* falls θ Nullstelle eines normierten, über $\mathbb{Q}$ irreduziblen ganzzahligen Polynoms

$$f(X) = X^r + a_{r-1}X^{r-1} + \cdots + a_1X + a_0, \qquad a_i \in \mathbb{Z},\ i = 0, 1 \ldots, r-1$$

ist. Das Polynom f heißt *Minimalpolynom* von θ. Sein Grad r heißt der *Grad* der algebraischen Zahl θ. Die Nullstellen dieses Polynoms sind die *algebraisch konjugierten Zahlen* zu θ.

Die Pisot-Zahlen vom Grad 1 sind die natürlichen Zahlen $n \in \mathbb{N}$ mit $n > 1$. Diese besitzen nur jeweils sich selbst als Konjugierte. Ein wichtiges nichttriviales Beispiel vom Grad 2, das uns im restlichen fortwährend begleiten wird, ist die *Zahl des goldenen Schnitts* τ. Der goldene Schnitt ist definiert als die Unterteilung einer Strecke in zwei Abschnitte derart, daß das Verhältnis der gesamten Strecke zum größeren Abschnitt dasselbe ist wie das Verhältnis des größeren Abschnitts zum kleineren Abschnitt. Sei τ dieses Verhältnis, so berechnet sich sofort $\tau^2 - \tau - 1 = 0$. Dies heißt, τ ist Nullstelle des ganzzahligen normierten über $\mathbb{Q}$ irreduziblen Polynoms

$$X^2 - X - 1 = (X - \tau)(X + \frac{1}{\tau}) \ .$$

Als Nullstellen ergeben sich

$$\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), \qquad \tau' = -\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{5}) \ .$$

Insbesondere gilt für die weitere algebraisch konjugierte Zahl $|\tau'| < 1$.

Pisot-Zahlen haben eine Reihe interessanter Eigenschaften. Hier möchte ich nur folgenden Satz von Meyer [Mey] zitieren:

Satz. *Ist Q ein Quasikristall und gilt $\alpha \cdot Q \subseteq Q$ mit einer reellen Zahl $\alpha > 1$, dann ist α entweder eine Pisotzahl oder eine Salemzahl.*

Salem-Zahlen sind entsprechend den Pisot-Zahlen definiert. Nur schwächt man die zweite Bedingung ab zu $|\theta_i| \leq 1$ und fordert, daß mindestens eine der Konjugierten den Betrag 1 haben muß.

Geometrisch bedeutet die Multiplikation des Quasikristalls mit der reellen Zahl α eine Streckungssymmetrie des Quasikristalls. Ist Q ein Gitter, so gilt $n \cdot Q \subseteq Q$ für alle $n \in \mathbb{N}$ im Einklang mit der Tatsache, daß die natürlichen Zahlen > 1 Pisot-Zahlen sind.

Mit Hilfe der Pisot-Zahlen möchte ich zuerst eindimensionale Quasikristalle konstruieren. Dazu muß ich leider etwas algebraischer werden. Ich werde aber versuchen, die Begriffe möglichst direkt an den obigen zwei Beispielen von Pisot-Zahlen (zum einen die natürlichen Zahlen und zum anderen τ) zu illustrieren. Sei θ eine feste Pisotzahl vom Grad r. Sei $\mathbb{K} = \mathbb{Q}(\theta)$ der kleinste Unterkörper von $\mathbb{R}$ der θ enthält. In der Algebra zeigt man, daß jedes Element von $\mathbb{K}$ in einer eindeutigen Weise als Polynom vom Grad $\leq r-1$ in θ geschrieben werden kann. $\mathbb{K}$ ist eine r-dimensionale Körpererweiterung von $\mathbb{Q}$. Sei θ_i eine der algebraisch konjugierten Zahlen zu θ (hierbei setzen wir $\theta_1 = \theta$), so gibt es einen Körperisomorphismus

$$\sigma_i : \mathbb{Q}(\theta) \;\to\; \mathbb{Q}(\theta_i) \qquad (\hookrightarrow \mathbb{C}\,), \qquad \theta \mapsto \theta_i \ .$$

Es ist $\sigma_1 = id$. Für den Fall $\theta = n \in \mathbb{N}$ ist $\mathbb{K} = \mathbb{Q}(n) = \mathbb{Q}$ und id ist der einzige Körperisomorphismus. Für $\theta = \tau$ gibt es daneben noch den Isomorphismus

$$\tau = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5}) \;\mapsto\; \tau' = \frac{1}{2}(1-\sqrt{5})\ .$$

Es handelt sich hierbei um einen Körperautomorphismus von $\mathbb{Q}(\tau)$, da $\tau' = -\frac{1}{\tau}$ bereits in diesem Körper liegt.

Sei Ω_θ der Ring der algebraisch ganzen Zahlen, welche in $\mathbb{Q}(\theta)$ liegen. Für $\theta = n$ ist $\Omega_n = \mathbb{Z}$. Insbesondere liegt hier ein Gitter vor. Für τ gilt

$$\Omega_\tau = \{\, m\tau + n \in \mathbb{R} \mid m, n \in \mathbb{Z} \,\}\ .$$

Da τ nicht in $\mathbb{Q}$ liegt, ist diese Teilmenge dicht in $\mathbb{R}$. Dasselbe gilt auch für beliebige Ω_θ, falls die Pisotzahl vom Grad > 1 ist. Es handelt sich also nicht um Delone-Mengen.

Setzt man allerdings

$$\Sigma_\theta \;:=\; \{\, \lambda \in \Omega_\theta \mid |\sigma_i(\lambda)| < 1,\ i = 2, \ldots, r \,\}\ ,$$

so gilt der folgende Satz:

Satz. [Mey] *Die Menge Σ_θ ist ein Quasikristall.* □

Für $\theta = n$ gilt $\Sigma_n = \Omega_n = \mathbb{Z}$. Es liegt sogar ein Kristall vor. Für $\theta = \tau$ erhalten wir $\sigma_2(m\tau + n) = m\sigma_2(\tau) + n = -m\frac{1}{\tau} + n$. Wir können also schreiben

$$\Sigma_\tau = \{\, m\tau + n \mid \tfrac{1}{\tau} m - 1 < n < \tfrac{1}{\tau} m + 1 \} \ .$$

Bild 6 zeigt die Paare $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$, welche die Bedingungen erfüllen. Um die Gerade durch den Ursprung mit der Steigung $\frac{1}{\tau}$ wird ein beidseitiger Streifen herausgeschnitten. Man bestimmt die Paare (m, n) innerhalb des Streifens und projiziert diese orthogonal auf die Gerade. Schreibt man die ersten positiven Elemente auf, die in Σ_τ liegen, so sind dies : $0,\ \tau,\ \tau + 1,\ 2\tau + 1,\ 2\tau + 2, \ldots$. Insbesondere sieht man sofort, daß diese Menge nicht abgeschlossen unter der Subtraktion ist, also kein Gitter sein kann. Genauer gilt:

$$\Sigma_\tau \ - \Sigma_\tau \quad \subseteq \quad \Sigma_\tau + \{-1, 0, 1\} \ .$$

Für die derart konstruierten Quasikristalle gilt

$$-\Sigma_\theta \ = \ \Sigma_\theta \ , \qquad \theta \in \Sigma_\theta \qquad \text{und} \qquad \theta \cdot \Sigma_\theta \subseteq \Sigma_\theta \ .$$

Letzteres folgt aus $|\sigma_i(\theta \cdot \lambda)| = |\sigma_i(\theta)| \cdot |\sigma_i(\lambda)| < 1$ für $i = 2, \ldots, r$ und $\lambda \in \Sigma_\theta$. Wir haben also einen Quasikristall, der invariant unter der Streckung mit dem Faktor θ ist.

Wie sieht dies in höheren Dimensionen aus? Natürlich kann man durch direkte Produkte solcher eindimensionalen Quasikristalle höherdimensionale erzeugen. Diese sind aber nicht so interessant, denn wir wollen ja welche haben, die Drehsymmetrien besitzen. Hier möchte ich nur den zweidimensionalen Fall betrachten. Die Ebene $\mathbb{R}^2$ kann man mit den komplexen Zahlen $\mathbb{C}$ identifizieren. Nach dieser Identifikation kann man eine Drehung als Multiplikation mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1 darstellen. Wir betrachten nur Drehungen um die Winkel $\frac{2\pi}{n}$, $n \in \mathbb{N}$. Dies entspricht einer Multiplikation mit der primitiven Einheitswurzel $\zeta_n = e^{(2\pi\,\mathrm{i})/n}$. Für $n > 2$ ist

$$\mathbb{Z} + \mathbb{Z} \cdot \zeta_n \ \subseteq \ \mathbb{C} \cong \mathbb{R}^2$$

immer ein Gitter. Ist es aber auch invariant unter der Multiplikation mit ζ_n? Notwendig und hinreichend dafür ist, daß es $a, b \in \mathbb{Z}$ gibt mit $\zeta_n^2 = a + b\zeta_n$. Dies ist genau für die kristallographisch erlaubten $n = 3,4,6$ der Fall. Für die anderen müßte man die entsprechenden ganzzahligen Vielfachen der höheren Potenzen hinzunehmen

$$\mathbb{Z} + \mathbb{Z}\zeta_n + \mathbb{Z}\zeta_n^2 + \cdots + \mathbb{Z}\zeta_n^{n-1} \,.$$

Leider ist dies für die anderen Werte von n eine dichte Menge in $\mathbb{R}^2$.

Wir wollen $\mathbb{Z}$ (dies war ja Σ_n) ersetzen durch geeignete Σ_θ.
Sei $\rho = \rho_n = \zeta_n + \bar{\zeta}_n \in \mathbb{R}$ ($\zeta_n^{-1} = \bar{\zeta}_n$). Sei ρ eine Pisotzahl[8]. Dies tritt z.B. für $n = 10$ ein. Wir erhalten $\rho = \tau$, also unsere wohlbekannte Zahl des goldenen Schnitts. Sei $Q' = \Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n$ gesetzt. Es handelt sich hierbei offensichtlich um einen zweidimensionalen Quasikristall. Besitzt er aber auch die gewünschte Rotationssymmetrie, d.h. ist er invariant unter der Multiplikation mit ζ_n? Multipliziert man die Definitionsgleichung für ρ mit ζ_n, so erhalten wir $\zeta_n^2 = \zeta_n \cdot \rho - 1$. Die Pisotzahl ρ ist in Σ_ρ. Es gilt also

$$\zeta_n \cdot (\Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n) \subseteq (\Sigma_\rho + \Sigma_\rho)\zeta_n - \Sigma_\rho \ \subseteq \Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n + F \cdot \zeta_n$$

mit einer endlichen Menge F, die durch $\Sigma_\rho - \Sigma_\rho \subseteq \Sigma_\rho + F$ bestimmt ist. Wir haben noch nicht die volle Rotationssymmetrie. Setzen wir allerdings

$$Q = \Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n + \Sigma_\rho\zeta_n^2 + \cdots + \Sigma_\rho\zeta_n^{n-1}$$

so erhalten wir offensichtlich volle Rotationssymmetrie. Die obige Rechnung zeigt, daß die Menge Q immer noch diskret ist und die Quasikristallbedingungen erfüllt. Es gilt z.B.

$$\Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n + \Sigma_\rho\zeta_n^2 \ \subseteq \ \Sigma_\rho + \Sigma_\rho\zeta_n + F \cdot \zeta_n + F \ .$$

Für $n = 10$ (und $\rho_{10} = \tau$) haben wir einen Quasikristall mit zehnfacher Rotationssymmetrie konstruiert. Lassen Sie mich zum Abschluß das Bild 7 zeigen. Es handelt sich hierbei um eine Kopie aus einem Preprint [Gaz] von J.P. Gazeau und zeigt die 10-fache Drehsymmetrie. Ich sollte darauf hinweisen, daß hier statt Σ_τ eine etwas größere Menge $\mathbb{Z}_\tau$ genommen wurde. Dies ist die Menge der τ-ganzen Zahlen. Diese sind wie folgt definiert. Sei $\beta > 1$ eine reelle Zahl. Man kann die Entwicklung der positiven reellen Zahlen statt nach den Potenzen einer natürlichen Zahl (> 1) auch allgemeiner

[8] Es genügt eine Pisotzahl θ zu finden, so daß der Ring der ganzen Zahlen in $\mathbb{Q}(\rho)$ von θ erzeugt wird.

nach den Potenzen von β ausführen. Die positiven β-ganzen Zahlen sind diejenigen Zahlen, deren *β-Entwicklung* nur aus positiven Potenzen von β bestehen. Die Menge $\mathbb{Z}_\beta$ erhält man, indem man davon die Negativen bildet und hinzunimmt. Also

$$\mathbb{Z}_\beta := \{ \pm \sum_{i=0}^{k} \alpha_i \beta^i \mid k \in \mathbb{N}, \alpha_i \in \{0, 1, \dots, [\beta]\} \} .$$

Hierbei bezeichne $[\beta]$ die größte ganze Zahl echt kleiner als β. Ist β eine Pisotzahl, dann ist $\mathbb{Z}_\beta$ ein (eindimensionaler) Quasikristall der Σ_β enthält. Ist die Pisotzahl eine natürlich Zahl n, dann gilt $\mathbb{Z}_\beta = \mathbb{Z}$. Warnung: Für beliebige β gilt $\mathbb{Z} \not\subseteq \mathbb{Z}_\beta$[9].

Mit dieser Methode kann man alle im Experiment auftretenden Zähligkeiten (und noch weitere) erzeugen.

(1) $n = 5$: Es gilt $\rho = \frac{1}{\tau}$. Die Konstruktion führt man mit der Zahl $\tau = \rho + 1$ aus.
(2) $n = 8$: Es gilt $\rho = \sqrt{2}$. Auch hier ist ρ keine Pisotzahl. Man benutzt die Pisotzahl $\theta = 1 + \rho = 1 + \sqrt{2}$. Sie ist Nullstelle des Polynoms $X^2 - 2X - 1$.
(3) $n = 10$: Wurde oben behandelt. Hier ist $\rho = \theta = \tau$.
(4) $n = 12$: Es gilt $\rho = \sqrt{3}$. Dies ist keine Pisotzahl. Jedoch ist $\theta = 2 + \rho$ Pisotzahl mit dem Minimalpolynom $X^2 - 4X + 1$.

Quasikristalle mit räumlicher Ikosaedersymmetrie werden konstruiert, indem man statt der Identifikation von $\mathbb{R}^2$ mit $\mathbb{C}$, die Identifikation des $\mathbb{R}^4$ mit den Hamiltonschen Quaternionen $\mathbb{H}$ vornimmt und dort entsprechende Konstruktionen wie oben ausführt. Wenn man alles auf die rein imaginären Quaternionen einschränkt, findet man die entsprechenden Strukturen im $\mathbb{R}^3$, siehe hierzu etwa [BM], [MP], [Pa].

Anhang A: Das Beugungsbild eines Quasikristalls

Der Ausgangspunkt dieses Vortrags war ein Beugungsbild mit einer "verbotenen Symmetrie". Ich habe hier Quasikristalle konstruiert, die solche für Kristalle verbotenen Symmetrien besitzen. Es bleibt die Frage, ob diese Quasikristalle überhaupt derartige Beugungsbilder erzeugen. Wie bereits erwähnt, sind die Beugungsbilder im Wesentlichen durch die Fouriertransformierte der Belegungsdichte gegeben. Genauer

[9] Für beliebiges β, d.h. β keine Pisotzahl, ist $\mathbb{Z}_\beta$ nicht notwendig ein Quasikristall. Für die sogenannten *Betazahlen* ist dies der Fall. Pisot-Zahlen sind Betazahlen.

gesagt ist es das Quadrat des Betrags dieser Fouriertransformierten, die Intensität. Diesen Unterschied möchte ich für diese sehr grobe Skizze ignorieren. Ist $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ eine Funktion, so ist die Fouriertransformierte $\hat{f}$ definiert durch

$$\hat{f}(s) := \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \mathrm{e}^{-2\pi\,\mathrm{i}\,\langle x,s\rangle} dx ,$$

falls das Integral sinnvoll ist. Diesen Formalismus kann und muß man erweitern, indem man Distributionen zuläßt. Ein wichtiges Beispiel ist die *Dirac-Distribution* δ_d (auch *Deltafunktion* genannt) mit Träger $d \in \mathbb{R}^n$. Als Distribution ordnet sie jeder Funktion f deren Funktionswert $f(d)$ zu. Physiker schreiben sie üblicherweise als eine "Funktion" $\delta_d(x) = \delta(x-d)$, welche durch den folgenden Integralausdruck

$$f(d) = \int_{\mathbb{R}^n} \delta_d(x) f(x) dx$$

"definiert" ist.

Für ihre Fouriertransformierte gilt

$$\widehat{\delta_d}(s) = \mathrm{e}^{-2\pi\,\mathrm{i}\,\langle s,d\rangle} .$$

Die Belegungsdichtefunktion einer Delone-Menge D, bei der an den Punkten der Menge Atome genau derselben Art sitzen, lautet

$$\rho(x) = \sum_{d \in D} \delta_d(x) .$$

Somit ergibt sich die Fouriertransformierte

$$\hat{\rho}(s) = \sum_{d \in D} \mathrm{e}^{-2\pi\,\mathrm{i}\,\langle s,d\rangle} .$$

Es erhebt sich die Frage, ob man dies wieder als Summe von Deltafunktionen schreiben kann. Oder allgemeiner: Kann man $\hat{\rho}(s)$ schreiben als Summe[10]

$$\hat{\rho}(s) = \sum_{t \in D'} c_t\, \delta_t(s) + \hat{\rho}_c(s)$$

[10] Auch hier sollte eigentlich die entsprechenden Zerlegung der Intensität stehen.

mit einer abzählbar unendlichen Menge D' (mit $c_t \neq 0$) und einem stetigen kontinuierlichen Anteil $\hat{r}_c$? Den ersten Anteil nennt man den diskreten Anteil. Unter einem *Kristall im modernen Sinne* versteht man heute eine Delone-Menge, deren Beugungsintensität einen abzählbar-unendlichen diskreten Anteil besitzt. Ich möchte gleich hier betonen, daß der Träger des diskreten Anteils nicht als diskret vorausgesetzt wird. Von Meyer wurde gezeigt, daß Quasikristalle vom endlichen Typ, wie ich sie oben eingeführt habe, Kristalle in diesem neuen Sinne sind. Siehe hierzu auch den Artikel von Bombieri und Taylor [BT].

Für den Fall, daß unser Quasikristall ein Gitter L ist, kann man das duale Gitter L^* einführen als

$$L^* := \{ y \in \mathbb{R}^n \mid \langle x, y \rangle \in \mathbb{Z}, \forall x \in L \} .$$

Aufgrund der Poissonschen Summationsformel

$$\sum_{b \in \mathbb{Z}^n} \widehat{\delta_b}(y) = \sum_{b \in \mathbb{Z}^n} \mathrm{e}^{-2\pi\,\mathrm{i}\,\langle b, y \rangle} = \sum_{a \in \mathbb{Z}^n} \delta_a(y)$$

gilt

$$\hat{\rho}(s) = \sum_{t \in L^*} \alpha\, \delta_t(s) .$$

Das heißt, das Beugungsbild hat als Träger gerade das duale Gitter. Für Quasikristalle, die keine Kristalle sind, ist der Träger des diskreten Anteils nicht diskret in $\mathbb{R}^n$. Wie kann trotzdem ein diskretes Bild entstehen? Das Geheimnis liegt in den Koeffizienten c_t. So wie ein Kristall aus endlich vielen Bahnen eines Gitters besteht, so besteht ein Quasikristall (von endlichem Typ) aus endlich vielen Bahnen einer *Modellmenge* im Sinne von Meyer [Mey]. Ich möchte hier nicht deren genaue Definition geben, sondern lediglich sagen, daß sich diese im Wesentlichen aus der Schneide- und Projiziere-Methode ergeben. Insbesondere sind unsere Mengen Σ_θ Modellmengen. Sei also Q ein Quasikristall, der bereits eine Modellmenge ist. Würde man den dualen Quasikristall wie das duale Gitter oben definieren, so bestände dieser in den meisten Fällen nur aus dem Nullvektor. Stattdessen benutzen wir die Definition [Mey]

$$Q^* := \{ y \in \mathbb{R}^n \mid \left|\mathrm{e}^{2\pi\,\mathrm{i}\,\langle y, x \rangle} - 1\right| \leq 1 \} .$$

Es zeigt sich, daß Q^* wieder ein Quasikristall (bzw. Modellmenge) ist. War Q invariant unter der Multiplikation mit θ, so ist es auch Q^*. War Q ein Gitter, so stimmt diese Definition des dualen Gitters mit der obigen überein.

Es sei definiert für alle $m \in \mathbb{N}$

$$Q_m^* := \underbrace{Q^* + Q^* + \cdots + Q^*}_{m\text{-mal}} .$$

Auch diese Q_m^* sind Quasikristalle. Im Fall des Gitters gilt natürlich $L_m^* = L^*$. Für den Fall, daß die Modellmengen noch einige Eigenschaften erfüllen ($Q = -Q$ und die zur Definition benutzte "Akzeptanzmenge" ist konvex – diese Voraussetzungen sind bei unseren Quasikristallen erfüllt) zeigt Meyer, daß

$$\hat{\rho} = \sum_{t \in S} c_t \, \delta_t(s)$$

mit einer abzählbar-unendlichen Menge S gilt und daß die Menge S durch die Q_m^* ausgeschöpft werden kann: $S = \bigcup_{m \in \mathbb{N}} Q_m^*$. Desweiteren kann geschrieben werden

$$\hat{\rho}(s) = \sum_{m=1}^{\infty} \nu_m(s), \quad \text{mit} \quad \nu_m(s) = \sum_{s_m \in Q_m^*} \alpha_m \delta_{s_m}(s) .$$

Hierbei fallen die ν_m sehr stark ab. Genauer gilt (als Maß aufgefaßt)

$$|\nu_m|(1_B) = O(m^{-N}), \quad \text{für alle Kugeln } B \text{ und alle } N \in \mathbb{N} .$$

Dies erklärt, warum nur die oberen Schichten, welche ja selbst wieder Quasikristalle sind, im Beugungsbild sichtbar sind.

Anhang B: Eine weitere Eigenschaft von Pisot-Zahlen

Lassen Sie mich auf eine weitere wichtige Charakterisierung von Pisot-Zahlen hinweisen. Für Pisot-Zahlen θ gilt

$$\theta^n \mod 1 \to 0 \quad \text{für} \quad n \to \infty .$$

Hierbei ist $\alpha \mod n$ als ein Element aus $[0,1)$ zu nehmen. Dies bedeutet, die Potenzen von Pisot-Zahlen nähern sich den ganzen Zahlen an. Erstaunlicherweise gilt zumindestens für algebraische Zahlen aber auch die Umkehrung:

Satz. [Cas] *Sei $\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha > 1$ und sei α eine algebraische Zahl. Sei weiter $\lambda \in \mathbb{R}$ mit $\lambda \neq 0$. Gilt*

$$\alpha^n \cdot \lambda \mod 1 \to 0 \quad \textit{für} \quad n \to \infty ,$$

dann ist α eine Pisotzahl (vom Grad r) und λ genügt den Bedingungen

$$\exists N \in \mathbb{N}_0, \exists \mu \in \mathbb{Q}(\alpha) \quad \textit{mit} \quad \lambda = \alpha^{-N}\mu \quad \textit{und} \quad \textit{Spur}(\alpha^j \mu) \in \mathbb{Z} \quad \textit{für}\ 0 \leq j \leq r-1 .$$

Einige weiterführende Literaturhinweise

[BM] Berman, S., Moody, R.V., *The algebraic theory of quasicrystals with five-fold symmetries*, J. Phys. A **27** (1994), 115-129.

[BT] Bombieri, E., Taylor J.E., *Quasicrystals, tilings, and algebraic number theory: some preliminary connections*, Contemp. Math **64** (1987), 241–264.

[Cas] Cassels, J.W.S., *An introduction to Diophantine approximation*, Cambridge University Press, 1957.

[Gaz] Gazeau J.P., *Pisot-cyclotomic integers for quasilattices*, preprint 1996.

[Mey] Meyer Y., *Quasicrystals, Diophantine approximation and algebraic numbers*, Beyond quasicrystals, Les Houches 1994 (Axel, F., Gratias, D., eds.), Springer, 1995, pp. 3–16.

[MP] Moody, R.V., Patera, J., *Quasicrystals and icosians*, J. Phys. A. **26** (1993), 2829–2853.

[Pa] Patera, J., *The pentacrystals*, Beyond quasicrystals, Les Houches 1994 (Axel, F., Gratias, D., eds.), Springer, 1995, pp. 17–27.

[Sen] Senechal, M., *Quasicrystals and geometry*, Cambridge University Press, 1995.

[SBGC] Shechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J.W., *Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry*, Phys. Rev. Lett. **53** (1984), no. 20, 183-185.

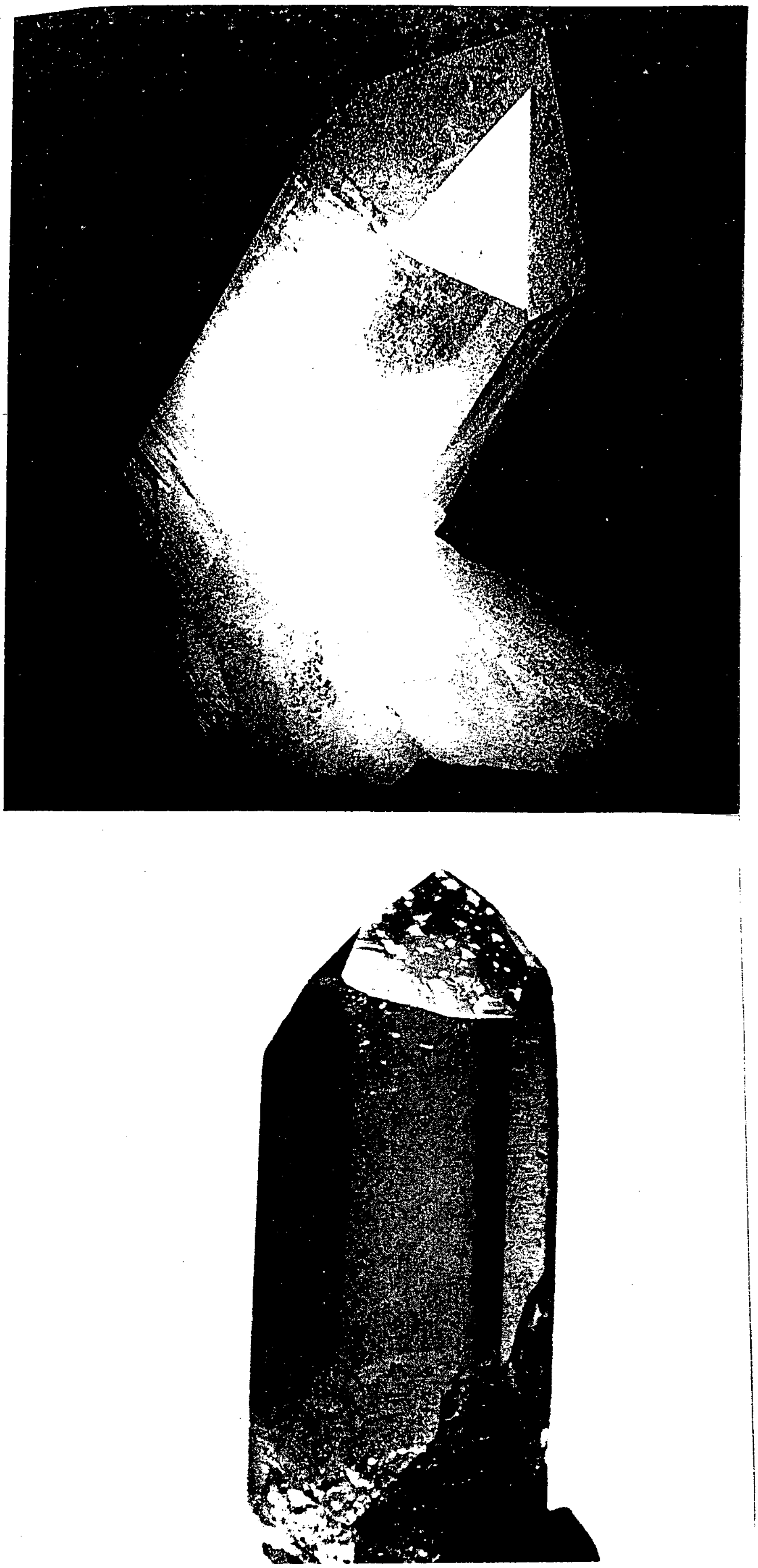


Bild 1: Bergkristalle

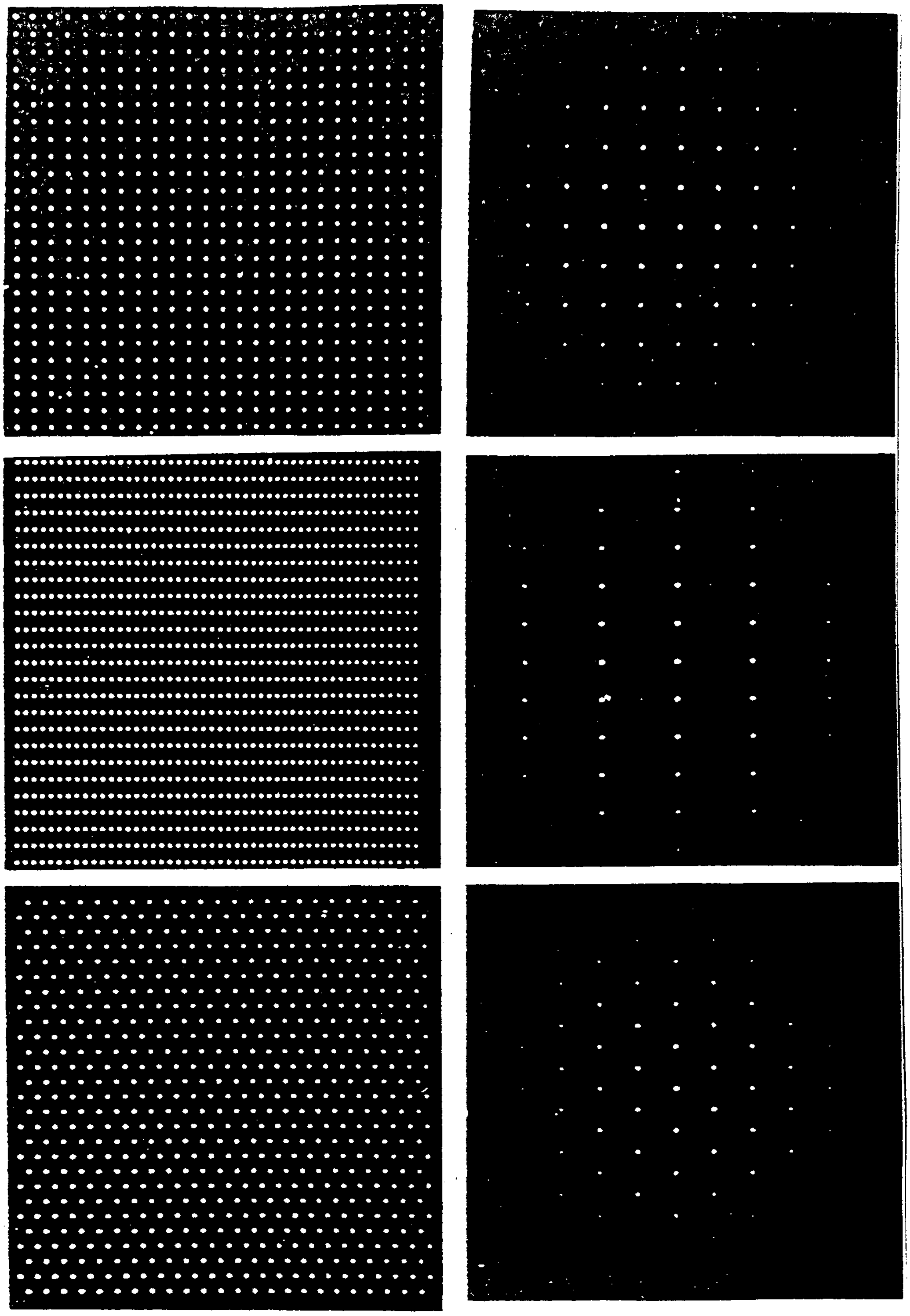


Bild 2: "Materiegitter"(links) und zugehöriges "Beugungsgitter"(rechts) (aus M. Senechal: Quasicrystals and geometry, 1995)

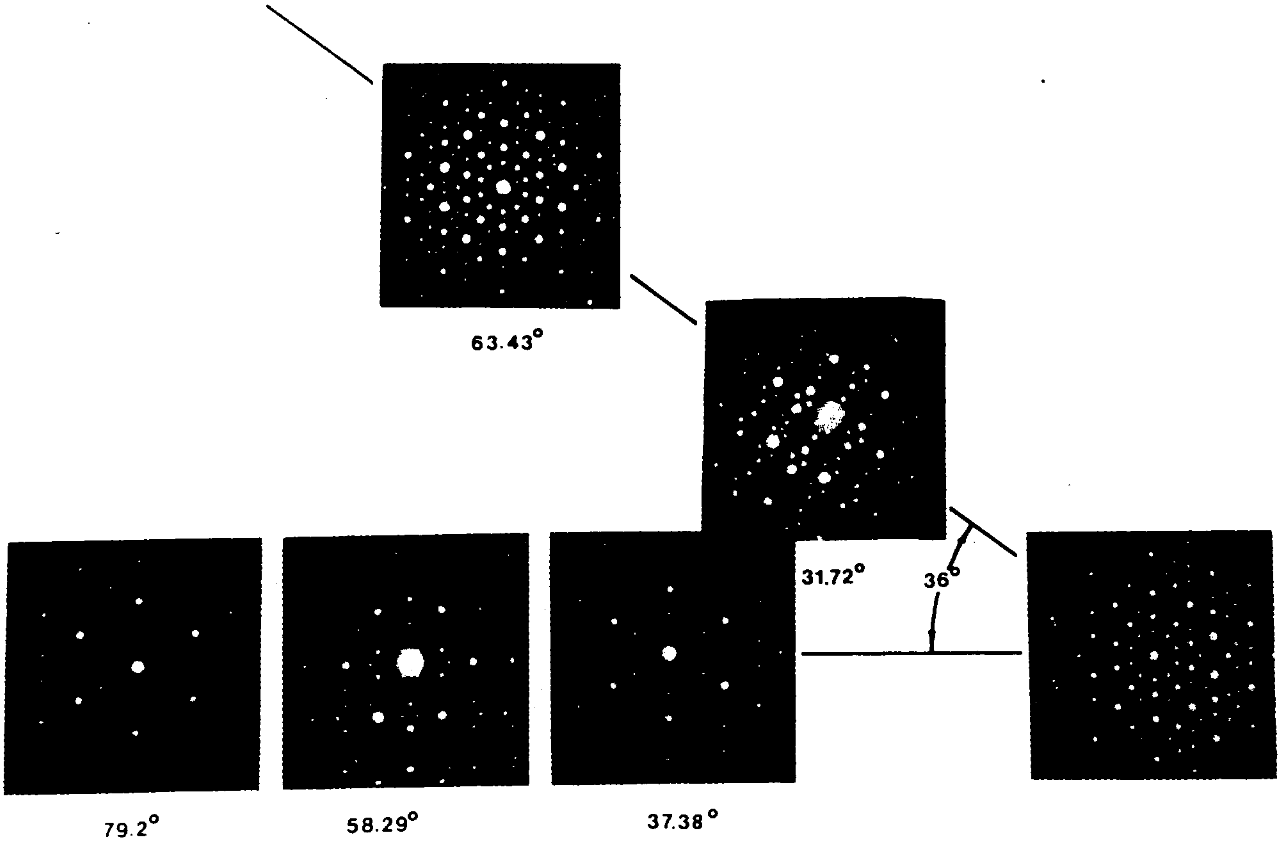


FIG. 2. Selected-area electron diffraction patterns taken from a single grain of the icosahedral phase. Rotations match those in Fig. 1.

Bild 3: Aus der Orginalarbeit von Shechtman, Blech, Gratias und Cahn mit dem Titel: "Metallic phase with long-range orientational order and no translation symmetrie", 1984

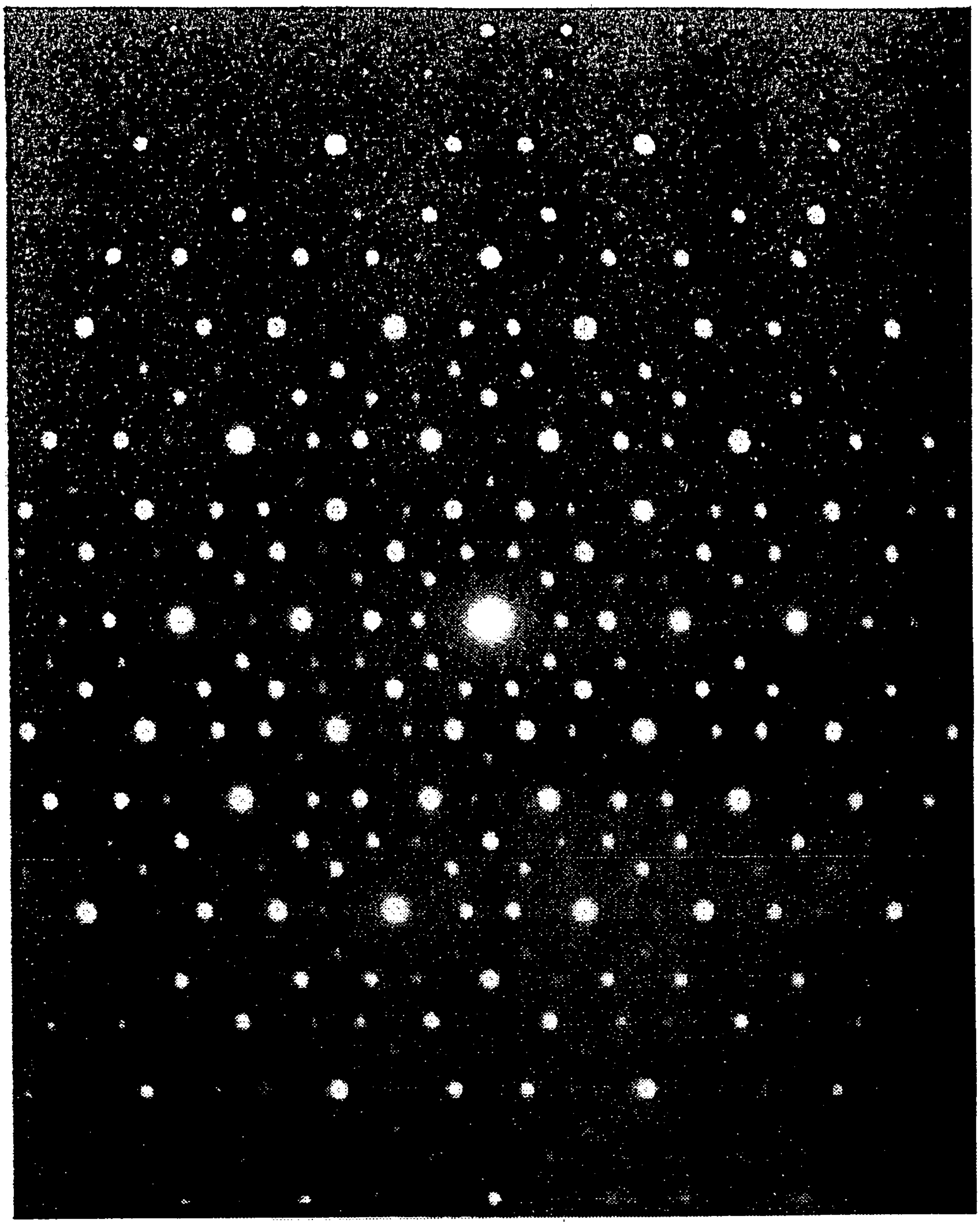


Bild 4: Die zehnzählige Symmetrie vergrößert dargestellt

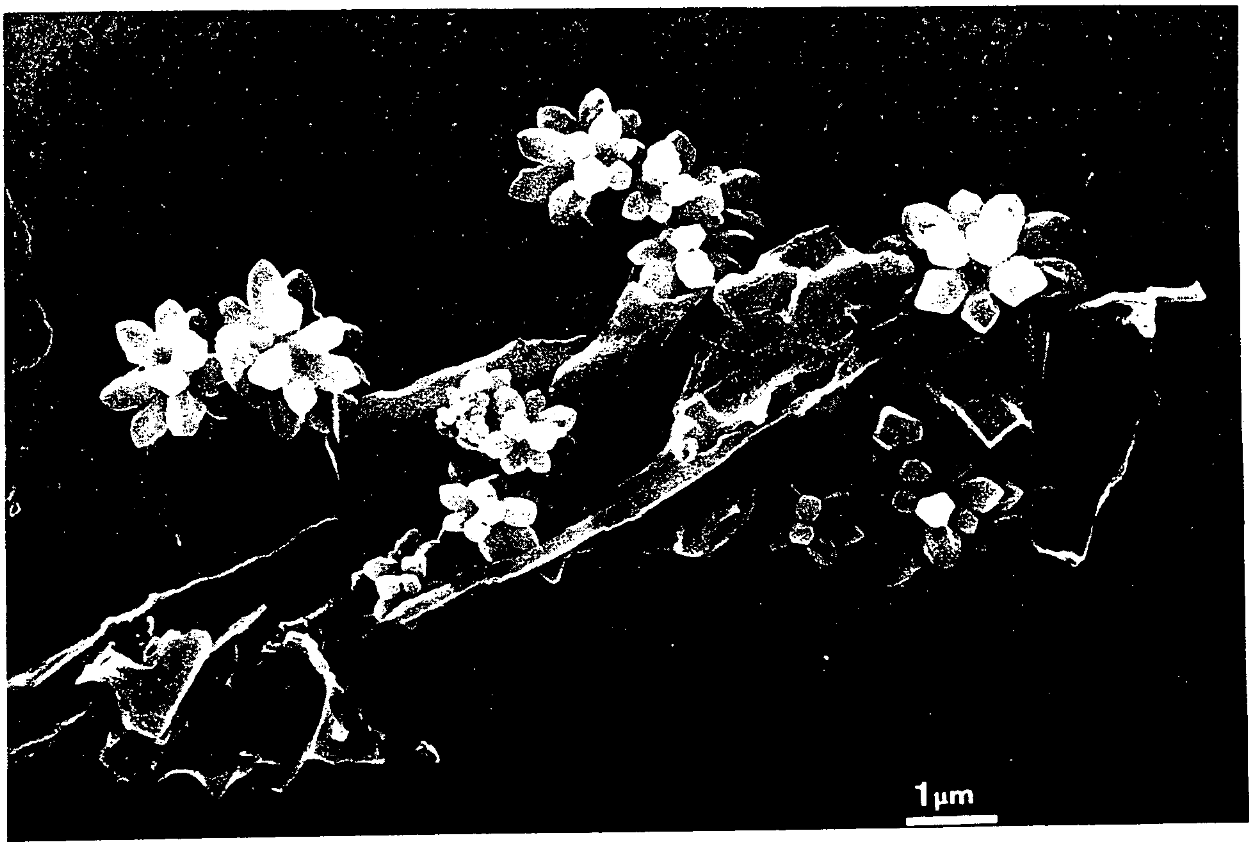
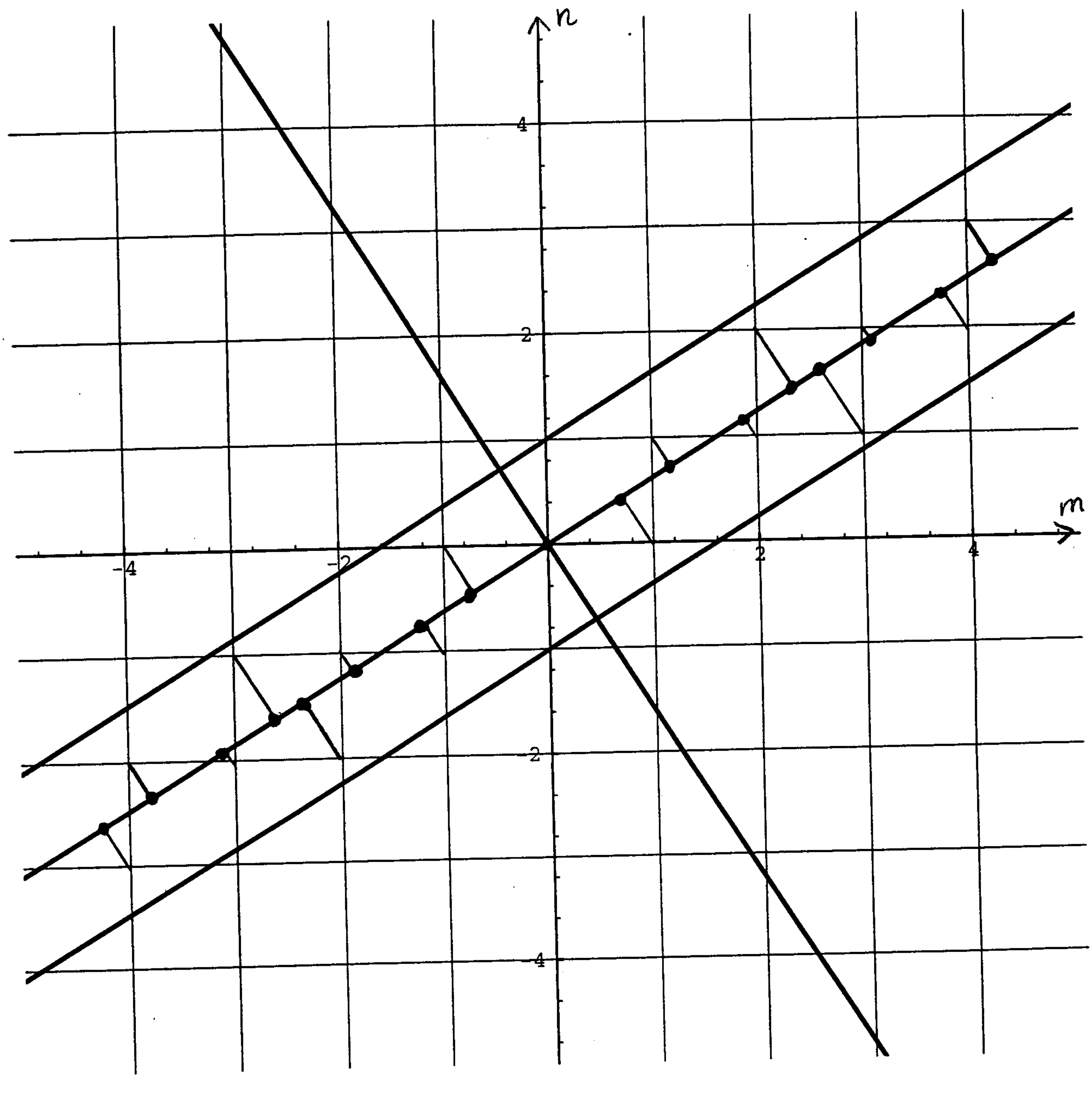


Bild 5: Ikosaedrische "Blumen" eines Al-Mn-Quasikristalls (aus Steinhardt/Ostlund: The physics of quasycristals, 1987)

Bild 6: Zur Konstruktion der Menge Σ_τ.



Die Geraden $h_{+1} = \frac{1}{\tau}x + 1$, $h_0 = \frac{1}{\tau}x$ und $h_{-1} = \frac{1}{\tau}x - 1$ und die dazu orthogonale Gerade $h_d = -\tau x$

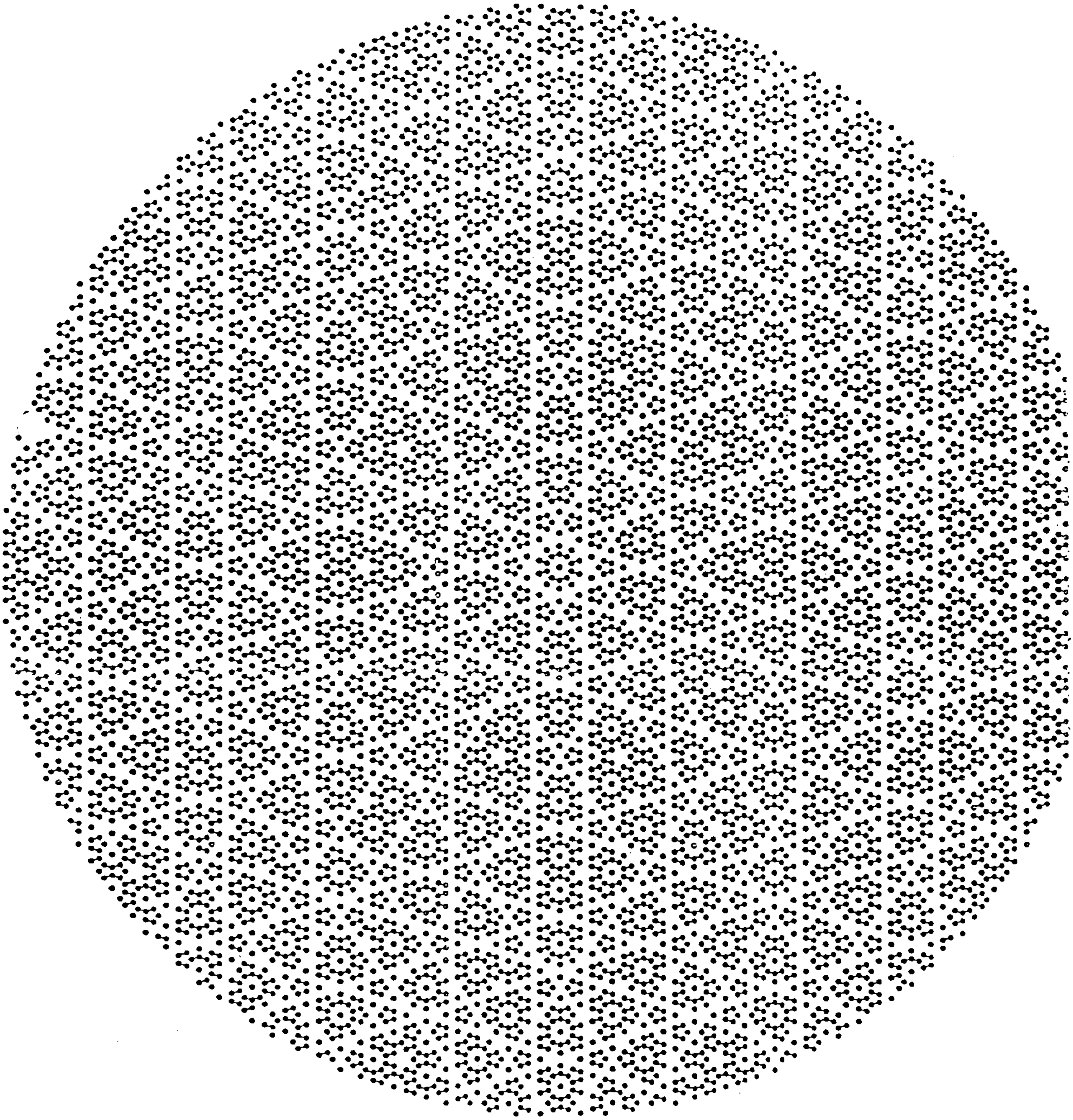


Bild 7: Der zweidimensionale Quasikristall mit 10-zähliger Symmetrie (aus J.P. Gazeau: Pisot-cyclotomic integers for quasilattices, 1996)