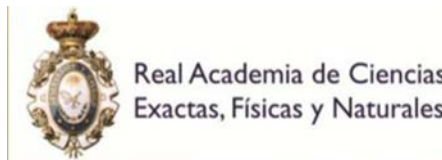


Cuasicristales: su prehistoria matemática y su relación con las ondas de Riemann

J.I. Díaz

**Instituto de Matemática Interdisciplinar &
Departamento de Análisis Matemático y Matemática Aplicada
Universidad Complutense de Madrid**



Real Academia de Ciencias

Madrid, 14 de Junio de 2018

0. Introducción

Antes de entrar en materia, sin entrar aún en detalles técnicos, esta conferencia (de carácter interdisciplinar) pretende subrayar el poder anticipativo de la matemática, su “irrazonable efectividad” y el gran valor *poético y estético* de su universalidad.

1. Cuasicristales (Premio Nobel de Química de 1984)
2. Cristalografía regular
3. Simetrías imposibles
4. Revisión del concepto de cristal vía la difracción de rayos X (Premios Nobel de 3 años): desembarco en el Análisis de Fourier.
5. Prehistoria matemática de los cuasicristales: Roger Penrose e Yves Meyer
6. Idealización: cuasicristales como medidas cristalinas *exóticas*
7. Una insospechada conexión: medidas cristalinas exóticas y ondas de Riemann

El gran protagonista de esta conferencia, en realidad, es
Yves F. Meyer (Tunez, 1939-)

Medalla Abel 2017

Académico Correspondiente Extranjero de la RAC 2018

https://en.wikipedia.org/wiki/Yves_Meyer



Conferencia Fundación Ramón Areces-RAC, 25 de Octubre de 2018

1. Cuasicristales (Premio Nobel de Química de 1984)

Cuando en 2011 se otorgó, el Premio Nobel de Química a Dan Shechtman (Tel Aviv 1941) por su descubrimiento, en 1982, de una aleación con una simetría de orden 10, y por tanto imposible desde el punto de vista de la Cristalografía, se estaba premiando también la profunda y viva relación que la Matemática venía manteniendo con la Cristalografía desde tiempos anteriores a Kepler y con implicaciones que recuerdan incluso las bellas ornamentaciones de la Alhambra y de otras muchas obras de la cultura árabe.

The Nobel prize in Chemistry 2011

Dan Shechtman

Technion - Israel Institute of Technology,
Haifa, Israel

"for the discovery of quasicrystals"



Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry

D. Shechtman and I. Blech

Department of Materials Engineering, Israel Institute of Technology–Technion, 3200 Haifa, Israel

and

D. Gratias

Centre d'Etudes de Chimie Métallurgique, Centre National de la Recherche Scientifique, F-94400 Vitry, France

and

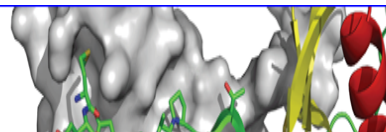
J. W. Cahn

Center for Materials Science, National Bureau of Standards, Gaithersburg, Maryland 20760

(Received 9 October 1984)

We have observed a metallic solid (Al–14-at.-%-Mn) with long-range orientational order, but with icosahedral point group symmetry, which is inconsistent with lattice translations. Its diffraction spots are as sharp as those of crystals but cannot be indexed to any Bravais lattice. The solid is metastable and forms from the melt by a first-order transition.

Aquí no nos referiremos a las importantes propiedades físico-químicas de los cuasicristales (...otra conferencia)



Views

- [Page](#)
- [Discussion](#)
- [View source](#)
- [History](#)

Personal tools

- [Log in / create account](#)

Toolbox

- [What links here](#)
- [Related changes](#)
- [Special pages](#)
- [Printable version](#)
- [Permanent link](#)

Aperiodic crystal

Cristal aperiódique (Fr). *Aperiodischer Kristall* (Ge). *Cristallo aperiodico* (It). *非周期性結晶* (Ja). *Cristal aperiódico* (Sp).

Definition

The definition of aperiodic crystal was included in the definition of *crystal* proposed by the IUCr Commission on Aperiodic Structures (International Union of Crystallography, 1992): by *crystal* we mean any solid having an essentially discrete diffraction diagram and *aperiodic crystal* we mean any crystal in which three-dimensional lattice periodicity can be considered to be absent. As an extension, the latter term will also include those crystals in which three-dimensional periodicity is too weak to describe significant correlations in the atomic configuration, but which can be properly described by crystallographic methods developed for actual aperiodic crystals.

For practical purposes, however, many scientists currently working in the field use a narrower definition of aperiodic crystal, namely

A *periodic crystal* is a structure with, ideally, sharp diffraction peaks on the positions of a *reciprocal lattice*. The structure then is invariant under the translations of the *direct lattice*. Periodicity here means *lattice periodicity*. Any structure without this property is *aperiodic*. For example, an amorphous system is aperiodic. An *aperiodic crystal* is a structure with sharp diffraction peaks, but without lattice periodicity. Therefore, amorphous systems are not aperiodic crystals. The positions of the sharp diffraction peaks of an aperiodic crystal belong to a *vector module* of finite rank. This means that the diffraction wave vectors are of the form

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^n h_i \mathbf{a}_i^* \text{ (integer } h_i \text{)}.$$

The basis vectors \mathbf{a}_i^* are supposed to be independent over the rational numbers, *i.e.* when a linear combination of them with rational coefficients is zero, all coefficients are zero. The minimum number of basis vectors is the *rank* of the vector module. If the rank n is larger than the space dimension, the structure is not periodic, but aperiodic.

Applications

There are four classes of aperiodic structures, but these classes have an overlap:

- incommensurate modulated structures
- incommensurate composite crystals
- quasicrystals
- and incommensurate magnetic structures

Reference

International Union of Crystallography (1992). *Acta Cryst.* **A48**, 928. *Terms of reference of the IUCr Commission on Aperiodic Crystals.*

Uff !!!!

Empecemos por algo más sencillo:

2. Cristalografía regular

Cualquier material está formado por átomos, iones o moléculas, organizados o enlazados entre si para formar redes tridimensionales.

Los átomos e iones se encuentran organizados de forma simétrica en redes elementales, que se repiten indefinidamente formando una estructura cristalina.

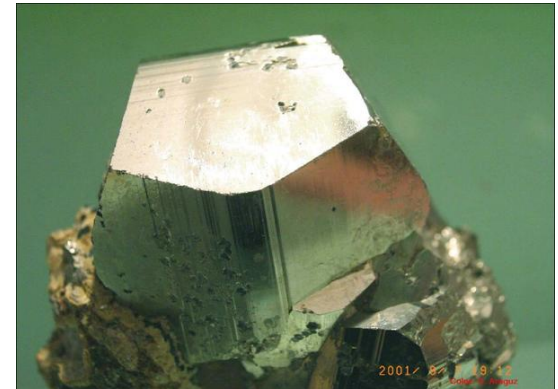
Hasta 1990 el Estado Sólido consideraba que las redes atómicas, moleculares o iónicas podían ser: ordenadas (redes cristalinas) y desordenadas (redes de vidrios, de polímeros, amorfos etc.)



**Cuarzo
Cristal**



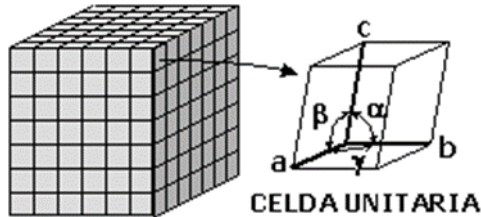
**Obsidiana
Vidrio**



**Pirita Cristal dodecaedro
pentagonal**

Quasicristal

¡Fuera esa clasificación!



Un **sólido cristalino** se construye a partir de la repetición en el espacio de una estructura elemental **paralelepípedica** denominada **celda unitaria**. En función de los parámetros de red, es decir, de las longitudes de los lados o ejes del paralelepípedo elemental y de los ángulos que forman, se distinguen **siete sistemas cristalinos**:

Sistema cristalino	Ejes	Ángulos entre ejes
<u>Cúbico</u>	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<u>Tetragonal</u>	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<u>Ortorrómbico</u>	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
<u>Hexagonal</u>	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
<u>Trigonal</u> (o Romboédrica)	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
<u>Monoclínico</u>	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$
<u>Triclínico</u>	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma, \alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$

En función de las posibles localizaciones de los átomos en la celda unitaria se establecen 14 estructuras cristalinas básicas, las denominadas **redes de Bravais** (1850: Auguste Bravais (1811-1863)).

Las 14 estructuras cristalinas básicas (redes de Bravais)

Auguste Bravais (1811-1863) de la misma promoción que Evariste Galois (olimpiada matemática). Descubrimiento de que eran solo 14 tipos en 1848






Sistema cristalino	Redes de Bravais			
triclínico	P			
monoclínico	P	C		
	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 	$\beta \neq 90^\circ$ $a \neq c$ 		
ortorrómbico	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$
tetragonal	P	I		
	$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
romboédrico (trigonal)	P			
	$\alpha \neq 90^\circ$ 			
hexagonal	P			
cúbico	P	I	F	
	a 	a 	a 	

Simetría de traslación
Estructura repetitiva periódica

230 grupos espaciales en 3 dimensiones

Fedorov, 1891

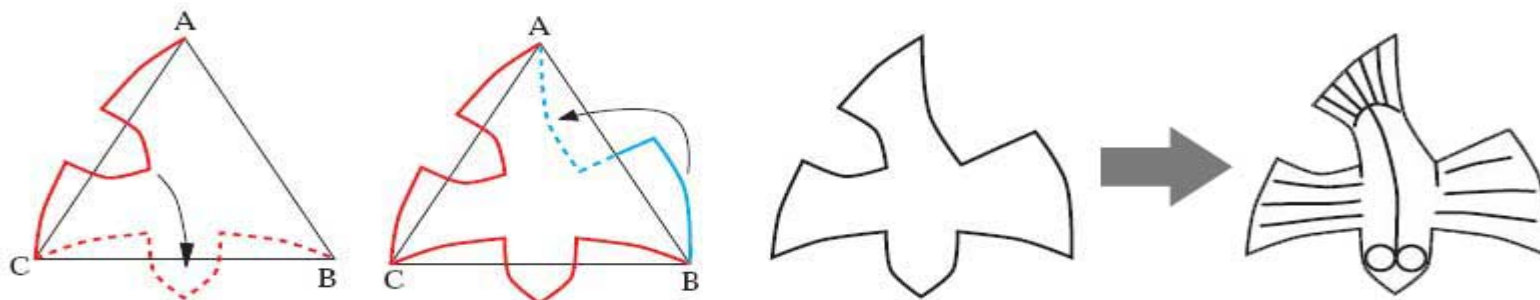
Los grupos espaciales en tres dimensiones están formados por combinaciones de los 32 grupos de puntos cristalográficos con las 14 redes de Bravais, y cada una de estas pertenece a uno de los 7 sistemas de redes. Esto muestra que cada grupo espacial es una combinación de la simetría de traslación de una celda unitaria incluyendo el centro de redes, las operaciones de simetría del grupo de puntos de reflexión, rotación y/o rotación impropia (también llamada rotoreflexión), y el eje helicoidal y el plano de deslizamiento de operaciones simétricas. La combinación de todas estas operaciones de simetría dan lugar a un total de **230 grupos espaciales diferentes que describen todas las posibles simetrías cristalinas.**

#	Sistema cristalino red de Bravais	Grupo puntual					Grupos espaciales (Abreviatura Internacional)
		Int'l	Bohón.	Notación Orbifold	Cox.	Ord.	
1	Triclinico (2)	1	C ₁	11	[1] [*]	1	P1
2		1	C ₁	1x	[2 [*] ,2 [*]]	2	P1
3-5	Monoclinico (13)	2	C ₂	22	[2] [*]	2	P2, P2 ₁ C2
6-9		m	C _{2h}	*11	[1]	2	Pm, Pc Cm, Cc
10-16		2/m	C _{2h}	2*	[2,2 [*]]	4	P2/m, P2 ₁ /m C2/m, P2 ₁ /c, P2 ₁ /c C2/c
16-24	Ortorómbico (59)	222	D ₂	222	[2,2] [*]	4	P222, P222 ₁ , P2 ₁ 2 ₁ 2, P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ , C222 ₁ , C222, F222, I222, I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
25-46		mm2	C _{2v}	*22	[2]	4	Pmm2, Pmc2 ₁ , Pcc2, Pma2, Pca2 ₁ , Pnc2, Pmn2 ₁ , Pba2, Pna2 ₁ , Pnn2 Cmm2, Cmc2 ₁ , Ccc2, Amm2, Acm2, Ama2, Aaa2 Fmm2, Fdc2 Imm2, Iba2, Ima2
47-74		m3m	D _{2h}	*222	[2,2]	8	Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pmna, Pmna, Pcca, Pbam, Poon, Pbon, Pnmm, Pmmm, Pbcn, Pbca, Pnma Cmcm, Cmce, Cmmm, Cbcm, Cmme, Ccce Fmmm, Fdcd Immm, Ibam, Ibcn, Imma
75-80	Tetraédrico (68)	4	C ₄	44	[4] [*]	4	P4, P4 ₁ , P4 ₂ , P4 ₃ , I4, I4 ₁
81-82		4	S ₆	2x	[2 [*] ,4 [*]]	4	F4, I4
83-88		4/m	C _{4h}	4*	[2,4 [*]]	8	P4/m, P4 ₂ /m, P4/m, P4 ₂ /m I4/m, I4 ₁ /a
89-98		422	D _{2d}	224	[2,4] [*]	8	P422, P4 ₂ 2, P4 ₁ 22, P4 ₁ 2 ₁ 2, P4 ₂ 22, P4 ₂ 2 ₁ 2, P4 ₂ 2 ₁ 2 I422, I4 ₁ 22
99-110		4mm	C _{4v}	*44	[4]	8	P4mm, P4bm, P4 ₂ cm, P4 ₂ nm, P4cc, P4nc, P4 ₂ mc, P4 ₂ bc I4mm, I4cm, I4 ₁ md, I4 ₁ cd
111-122		42m	D _{2d}	2*2	[2 [*] ,4]	8	P42m, P42c, P42 ₁ m, P42 ₁ c, P4m2, P4c2, P4 ₂ b2, P4n2 I4m2, I4c2, I4 ₂ m, I4 ₂ c
123-142	4/m3m	D _{4h}	*224	[2,4]	16	P4/m3m, P4/m3c, P4/m3n, P4/m3n, P4/m3c, P4/m3n, P4/m3c, P4/m3n, P4/m3c, P4/m3n, P4/m3c, P4/m3n, P4/m3c, P4/m3n I4/m3m, I4/m3c, I4 ₁ /a3m, I4 ₁ /a3c	
143-148	Trigonal (25)	3	C ₃	33	[3] [*]	3	P3, P3 ₁ , P3 ₂ R3
147-148		3	S ₆	3x	[2 [*] ,6 [*]]	6	P3, R3
149-166		32	D _{3d}	223	[2,3] [*]	6	P312, P321, P3 ₁ 12, P3 ₂ 21, P3 ₁ 12, P3 ₂ 21 R32
167-181		3m	C _{3v}	*33	[3]	6	P3m1, P31m, P3c1, P31c R3m, R3c
182-197		3m	D _{3d}	2*3	[2 [*] ,6]	12	P31m, P31c, P3m1, P3c1 R3m, R3c
198-173	Hexagonal (27)	6	C ₆	66	[6] [*]	6	P6, P6 ₁ , P6 ₂ , P6 ₃ , P6 ₄ , P6 ₅
174		6	C _{3h}	3*	[2,3 [*]]	6	P6
175-176		6/m	C _{6h}	6*	[2,6 [*]]	12	P6/m, P6 ₃ /m
177-182		622	D _{6h}	226	[2,6] [*]	12	P622, P6 ₁ 22, P6 ₂ 22, P6 ₃ 22, P6 ₄ 22, P6 ₅ 22
183-188		6mm	C _{6v}	*66	[6]	12	P6mm, P6cc, P6 ₃ cm, P6 ₃ mc
187-190		6m2	D _{3h}	*223	[2,3]	12	P6m2, P6c2, P62m, P62c
191-194	6/mmm	D _{6h}	*226	[2,6]	24	P6/mmm, P6/mcc, P6 ₃ /mcm, P6 ₃ /mcc	
195-199	Cúbico (36)	23	T	332	[3,3] [*]	12	P23, P23 ₁ , I23 P2 ₁ 3, I2 ₁ 3
200-208		m3	T _h	3*2	[3 [*] ,4]	24	Pm3, Pn3, Fm3, Fd3, Im3, Pa3, Ia3
207-214		432	O	432	[3,4] [*]	24	P432, P4 ₂ 32 F432, F4 ₁ 32 I432 P4 ₃ 32, P4 ₁ 32, I4 ₁ 32
215-220		23m	T _d	*332	[3,3]	24	P43m, P43n, I43m P43n, F43c, I43d
221-230		m3m	O _h	*432	[3,4]	48	Pm3m, Pn3n, Pm3n, Pn3m Fm3m, Fm3c, Fd3m, Fd3c Im3m, Ia3d

https://es.wikipedia.org/wiki/Grupo_espacial

Señalemos que **en el plano solo hay 17 grupos, e.d., 17 únicos tipos de teselaciones** (distribuciones planas de un conjunto de figuras que se repiten sin límite, sin superponerse y sin dejar ningún hueco).

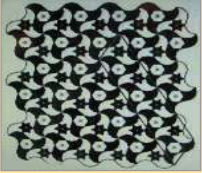










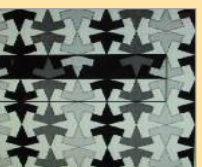

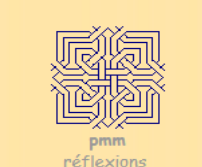





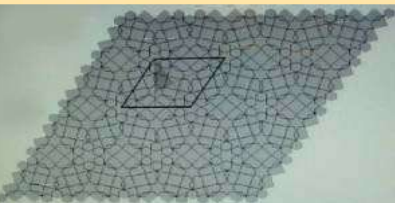

A partir de las teselaciones simétricas se pueden construir teselaciones asimétricas (arte árabe, ...Escher,...)



Los 17 grupos de la Alhambra



<http://www.alhambra-patronato.es/elblogdelmuseo/index.php/geometria-matematica-alicatados/>

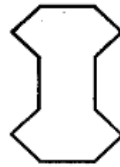
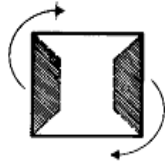
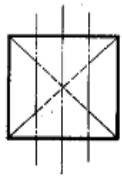
 <p>p1 translations </p>	 <p>p2 rotations de 180° </p>	 <p>p3 rotations de 120°</p>	 <p>p4 rotations de 180° et rotations de 90°</p>
 <p>p6 rotations de 120° et rotations de 180° </p>	 <p>p9 réflexion axiale puis translation</p>	 <p>p9g réflexions d'axes perpendiculaires</p>	 <p>pm réflexions et translation</p>
 <p>cm réflexion et une autre avec translation</p>	 <p>pmg réflexion et rotations de 180°</p>	 <p>pmm réflexions d'axes perpendiculaires et rotations de 180°</p>	 <p>cmm réflexions d'axes perpendiculaires et une rotation de 90°</p>
 <p>p4g réflexion et rotation de 90°</p>	 <p>p3m1 réflexions dans un triangle équilatéral</p>	 <p>p31m rotation de 120° et réflexion</p>	 <p>p4m deux réflexions d'axes perpendiculaires et une troisième</p>
 <p>p6m trois réflexions </p>			

Denominación matemática de cada grupo.

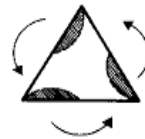
http://therese.eveilleau.pagesperso-orange.fr/pages/jeux_mat/textes/pavage_17_types.htm

Del arte nazarí a Escher:

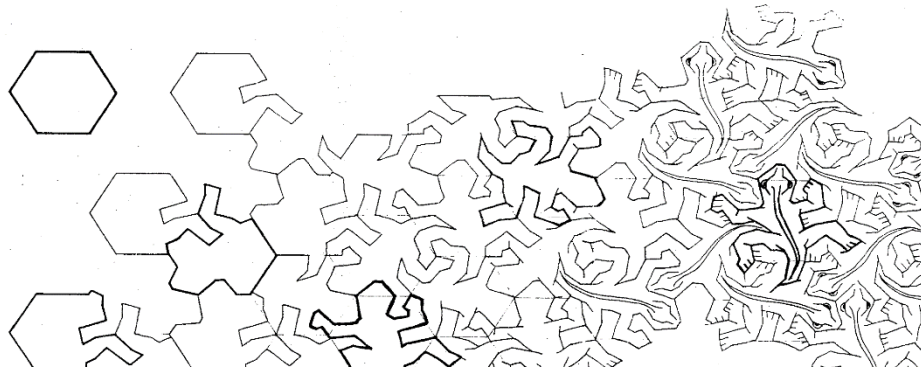
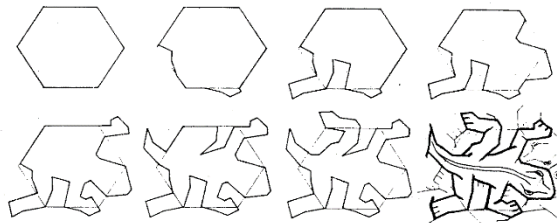
Nombre	Polígono Base	Transformación	Polígono Nazari
Hueso	Cuadrado		
Pajarita	Triángulo equilátero		
Pétalo	Rombo		



Pajarita Triángulo equilátero



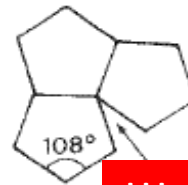
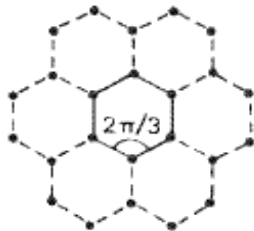
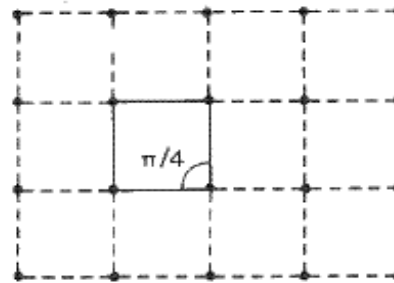
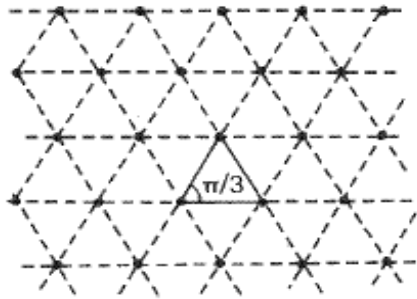
Pétalo Rombo



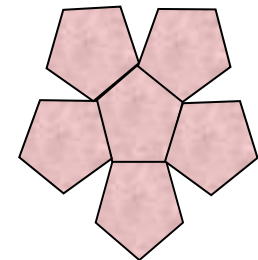
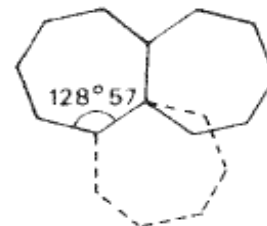
M. C. Escher (1898-1972)

3. Simetrías imposibles

Un teselado, regular o teselado con polígonos regulares es un teselado del plano que emplea un solo tipo de polígonos regulares. Estos patrones geométricos han sido ampliamente utilizados con fines decorativos desde la antigüedad. **Solo son posibles teselados regulares empleando triángulos equiláteros, cuadrados y hexágonos regulares.** El primer tratamiento matemático sistemático del tema fue el de **Kepler**.



!!! Imposible !!!



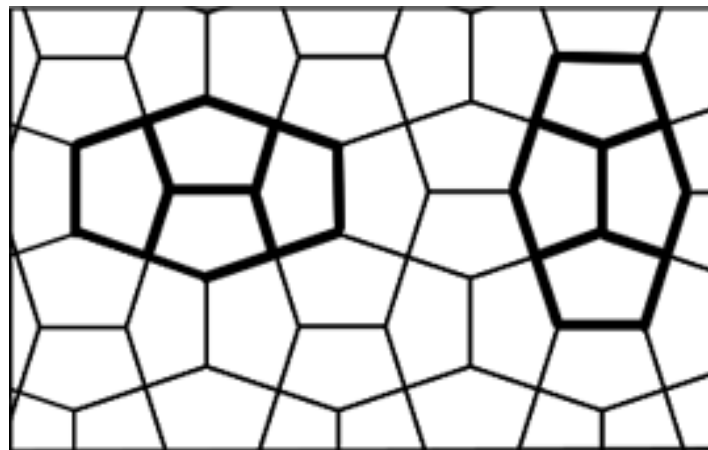
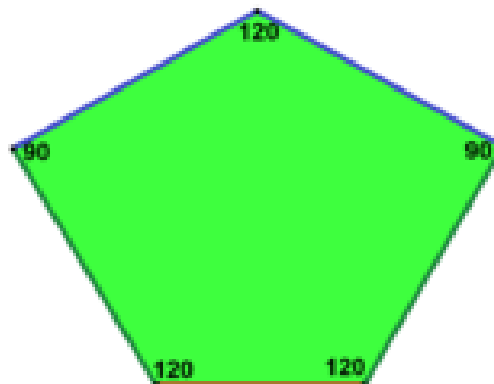
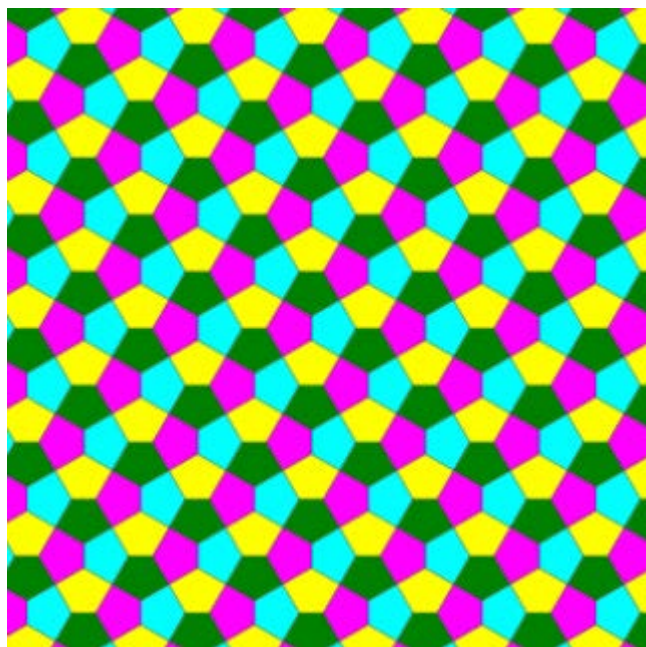
No es posible teselar sólo con pentágonos

Teorema de restricción cristalográfica: Las simetrías de rotación de orden 2, 3, 4 y 6 son las únicas permitidas.

Pero, ..., se pueden hacer teselaciones pentagonales a base de que no sean regulares:

Teselación de El Cairo: aparece frecuentemente en las calles de esa ciudad (y en los murales y arte islámico).

Percy Alexander MacMahon *New Mathematical Pastimes* 1921.

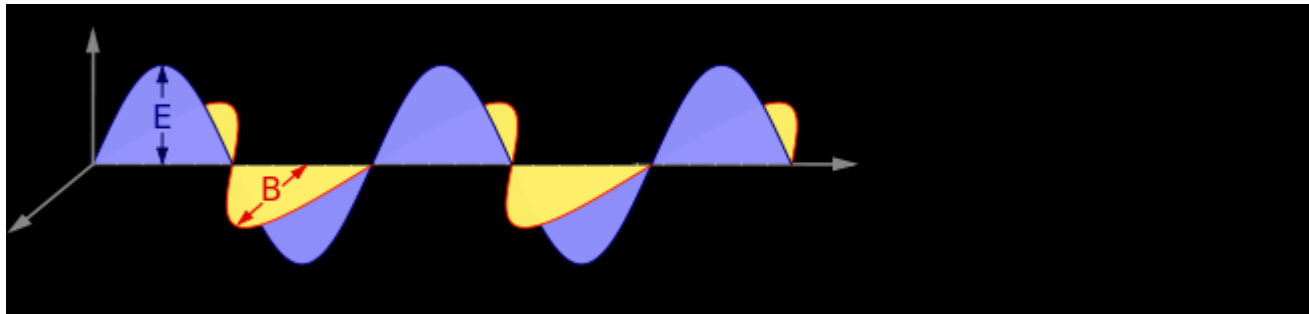


5. Revisión del concepto de cristal vía la difracción de rayos X (Premios Nobel de tres años diferentes): desembarco en el Análisis de Fourier

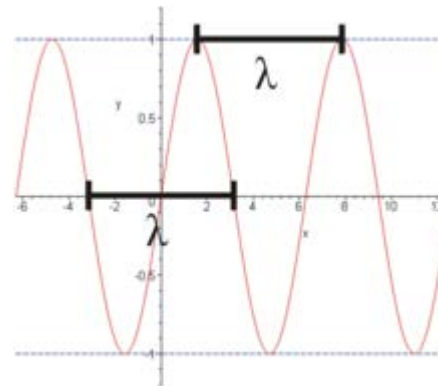
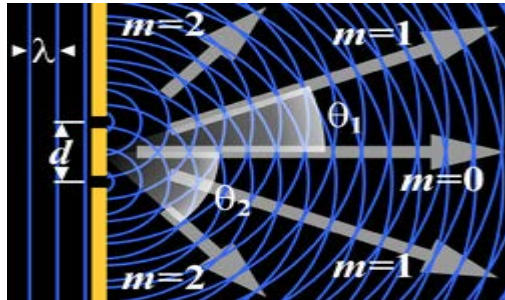
Para ir más allá de la periodicidad tridimensional (manteniendo unos ciertos patrones) hemos de pasar por las técnicas de reconocimiento de estructuras por medio de la difracción de rayos X (o similares).

La idea de que los **crisales** son una repetición periódica de un grupo de **moléculas** ya existía anteriormente a que **Wilhelm Conrad Röntgen** descubriera los **rayos X** en 1895 (Primer premio 'Nobel de Física, en 1901).

Ya se había superado la polémica sobre la teoría geométrica de la luz (Fermat, Newton,..) y su interpretación por Maxwell como ondas electromagnéticas.



Los experimentos de Young condujeron al estudio de la **difracción** como un fenómeno característico de las **ondas** que se basa en la desviación de estas al **encontrar un obstáculo o al atravesar una rendija** de un tamaño del orden de su longitud de onda.



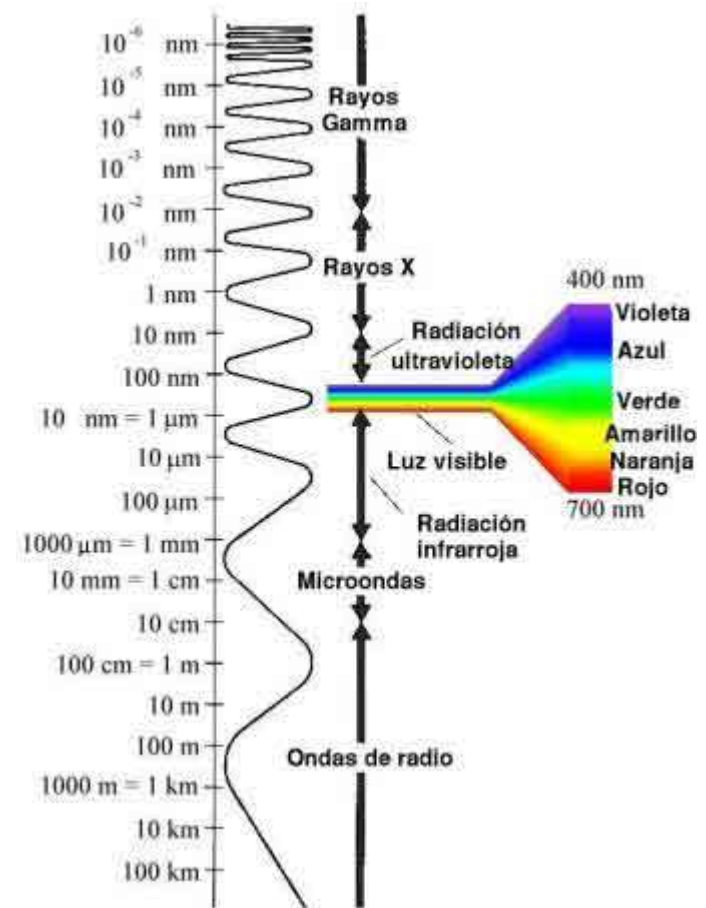
Recordemos que todas las radiaciones electromagnéticas se transmiten a la velocidad de la luz (300.000 km/segundo) en forma de ondas.

Mientras más corta sea la longitud de onda, más alta es la frecuencia de la misma. Onda corta, significa alta frecuencia. Onda larga, baja frecuencia.

La energía electromagnética en una particular longitud de onda λ (en el vacío) tiene una frecuencia f asociada y una energía de fotón E . Por tanto, el espectro electromagnético puede ser expresado igualmente en cualquiera de esos términos.

Por lo tanto, las ondas electromagnéticas de alta frecuencia tienen una longitud de onda corta y mucha energía mientras que las ondas de baja frecuencia tienen grandes longitudes de onda y poca energía.

Aunque las distancias típicas entre los planos de la red cristalina se desconocían, se sabía que debían ser muy pequeñas comparadas con la longitud de onda de la luz visible. Esto le dio al físico alemán **Max von Laue (1879-1960)** [Premio Nobel de Física de 1914, discípulo de Max Planck] la idea de utilizar cristales de sulfato de cobre para determinar si los rayos X se componían de partículas u ondas: dedujo que, si fueran ondas, deberían generar un patrón de difracción al atravesar los cristales.

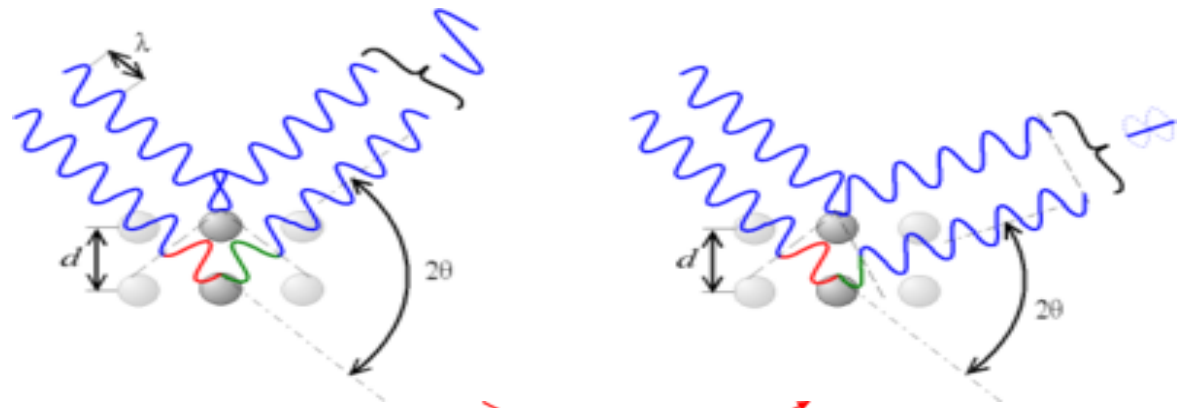
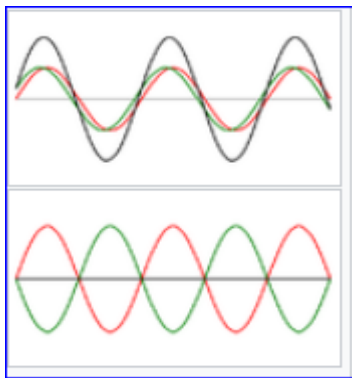


Difracción y red cristalina dual (o recíproca) de **von Laue**

(experimentos de 1912, con [W. Friedrich](#) y [P. Knipping](#), antiguos estudiantes de Röntgen
<http://toutestquantique.fr/en/crystallography/>)

El fenómeno de **difracción cristalina** tiene su origen en la *dispersión elástica o scattering elástico* del haz de rayos X por los átomos del cristal. En este tipo de interacción, el electrón desvía los rayos X, que toman exactamente la misma trayectoria que un **rayo de luz visible reflejado en un espejo**, es decir, los rayos dispersados emergen a un ángulo 2θ con respecto a la dirección de los rayos incidentes.

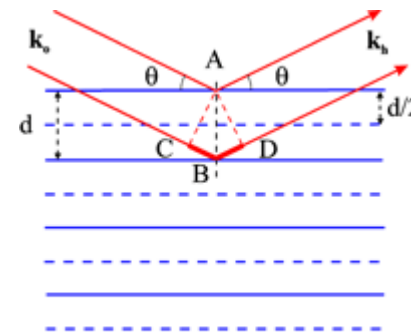
Además, la difracción cristalina es inseparable del fenómeno de **interferencia**



W.L. Bragg (1890-1971)

[Bragg, W. L. (1913), *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **17**, 43-57. *The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal*].

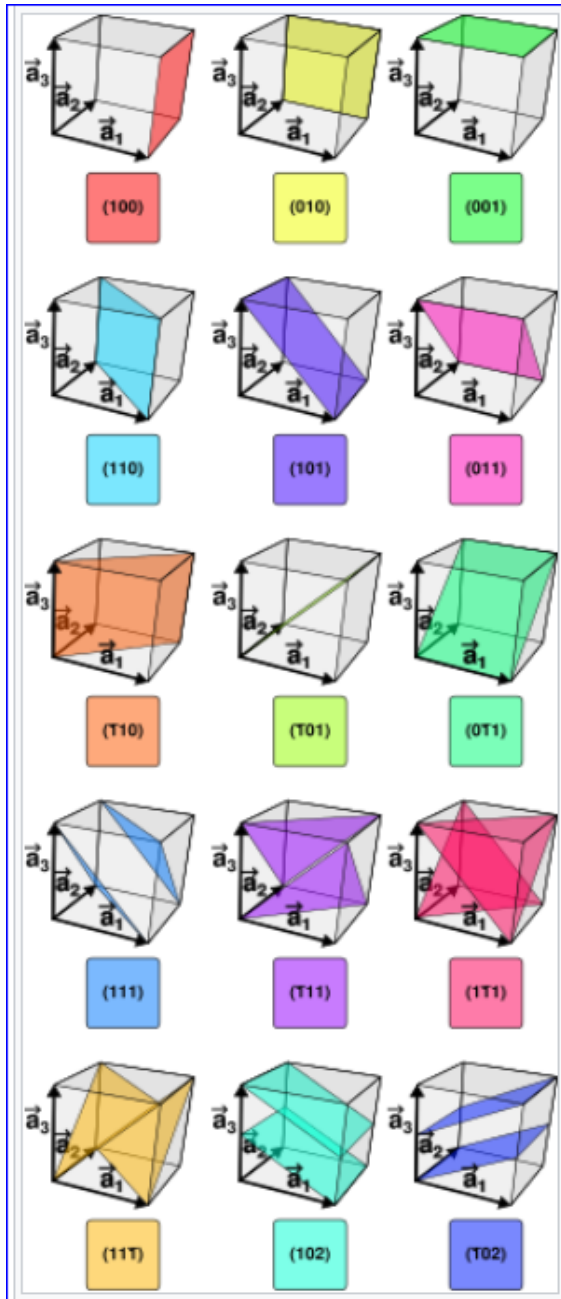
Premio Nobel de 2015 (junto a su padre W.H. Bragg (1862-1942). **Ambos fueron matemáticos de formación**



$$2 d \sin \theta = n \lambda$$

Figure 1

Indíces de W.H. Muller (1801 –1880) y el retículo dual

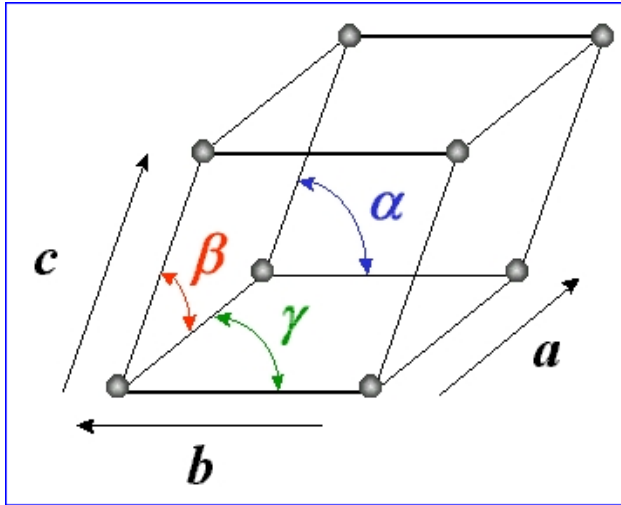


Para que se cumpla la ley de Bragg para un grupo de planos de reflexión paralelos, estos deben cruzar los ejes de la celda unidad un número entero de veces.

Las reflexiones cristalinas se identifican mediante tres números y iguales al número de intersecciones de los planos con los ejes **a**, **b** y **c** de la celda.

Los números **h**, **k** y **l** reciben el nombre de índices de Miller.

Matemáticamente, los índices de Miller describen un vector perpendicular al plano de reflexión en el sistema de coordenadas definido por la red cristalina.



Una célula elemental de un cristal está determinada por un triedro formado por tres vectores básicos \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} , formando los ángulos α , β , γ entre ellos.

La red de nodos se representa mediante los vectores $\mathbf{n} = u \mathbf{a} + v \mathbf{b} + w \mathbf{c}$ (u , v y w son enteros).

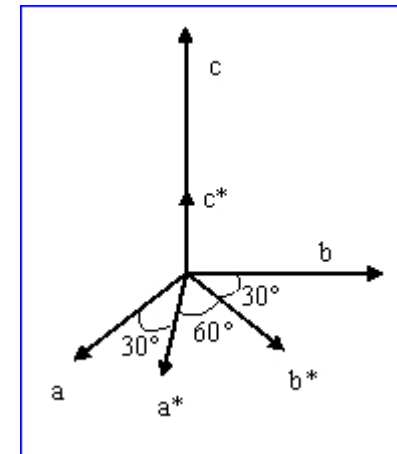
A esta red directa corresponde una **red recíproca**: los vectores \mathbf{a}^* ; \mathbf{b}^* ; \mathbf{c}^* con

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* = 1$, $\mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* = 1$, $\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = 1$, $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* = 0$, $\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* = 0$, $\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}^* = 0$, $\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = 0$, $\mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* = 0$, $\mathbf{c} \cdot \mathbf{b}^* = 0$.

Los nodos de la red recíproca son: $\mathbf{n}^* = h \mathbf{a}^* + k \mathbf{b}^* + l \mathbf{c}^*$ (h , k y l son números enteros, llamados **índices de Miller**)., Un vector de fila de la red recíproca es normal a un plano reticular de la red directa.

Los diferentes vectores de las dos redes se representan aquí para el caso particular de un sistema hexagonal ($\mathbf{a} = \mathbf{b} \neq \mathbf{c}$ y $\alpha = \beta = 90^\circ$ y $\gamma = 120^\circ$).

Se comprueba, por ejemplo, que el vector \mathbf{a}^* es perpendicular al plano reticular (\mathbf{b} , \mathbf{c}).



Base dual o recíproca

$$\mathbf{a}^* = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{b}^* = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a}}, \quad \mathbf{c}^* = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b}}$$

Otro tipo de notación:

En la malla elemental

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j^* = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

$$\vec{e}_1^* = \frac{1}{V} \vec{e}_2 \wedge \vec{e}_3,$$

$$\vec{e}_2^* = \frac{1}{V} \vec{e}_3 \wedge \vec{e}_1,$$

$$\vec{e}_3^* = \frac{1}{V} \vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2,$$

Volumen elemental

$$V = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \wedge \vec{e}_3) = \vec{e}_2 \cdot (\vec{e}_3 \wedge \vec{e}_1) = \vec{e}_3 \cdot (\vec{e}_1 \wedge \vec{e}_2).$$

Y llegamos al Análisis de Fourier:

En matemáticas, una serie de Fourier es una forma de representar una función como la suma de ondas sinusoidales simples. Más formalmente, descompone cualquier función periódica o señal periódica en la suma de un conjunto (posiblemente infinito) de funciones oscilantes simples, a saber, senos y cosenos (o, de manera equivalente, exponenciales complejos).

Las series de Fourier reciben su nombre en honor a Jean-Baptiste Joseph Fourier (1768-1830), quien hizo importantes contribuciones al estudio de series trigonométricas, (memoria de 1807, libro de 1822), después de las investigaciones preliminares de Leonhard Euler, Jean le Rond d'Alembert y Daniel Bernoulli.

Desde un punto de vista más actual, los resultados de Fourier son algo informales debido a la falta de precisión en la noción de la función matemática y la integración a inicios del siglo XIX. Después, Peter G. L. Dirichlet y B. Riemann expresaron los resultados de Fourier con mayor precisión y formalidad.

The three-dimensional Bravais lattice is defined as the set of vectors of the form:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

where n_i are integers and \mathbf{a}_i are three linearly independent vectors. Assuming we have some function, $f(\mathbf{r})$, such that it obeys the following condition for any Bravais lattice vector \mathbf{R} : $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, we could make a Fourier series of it. It is useful to make a Fourier series of the potential then when applying Bloch's theorem. First, we may write any arbitrary vector \mathbf{r} in the coordinate-system of the lattice:

$$\mathbf{r} = x_1 \frac{\mathbf{a}_1}{a_1} + x_2 \frac{\mathbf{a}_2}{a_2} + x_3 \frac{\mathbf{a}_3}{a_3},$$

where $a_i = |\mathbf{a}_i|$.

Thus we can define a new function,

$$g(x_1, x_2, x_3) := f(\mathbf{r}) = f\left(x_1 \frac{\mathbf{a}_1}{a_1} + x_2 \frac{\mathbf{a}_2}{a_2} + x_3 \frac{\mathbf{a}_3}{a_3}\right).$$

This new function, $g(x_1, x_2, x_3)$, is now a function of three-variables, each of which has periodicity a_1, a_2, a_3 respectively:

$$g(x_1, x_2, x_3) = g(x_1 + a_1, x_2, x_3) = g(x_1, x_2 + a_2, x_3) = g(x_1, x_2, x_3 + a_3).$$

If we write a series for g on the interval $[0, a_1]$ for x_1 , we can define the following:

$$h^{\text{one}}(m_1, x_2, x_3) := \frac{1}{a_1} \int_0^{a_1} g(x_1, x_2, x_3) \cdot e^{-i2\pi \frac{m_1}{a_1} x_1} dx_1$$

And then we can write:

$$g(x_1, x_2, x_3) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} h^{\text{one}}(m_1, x_2, x_3) \cdot e^{i2\pi \frac{m_1}{a_1} x_1}$$

Further defining:

$$\begin{aligned} h^{\text{two}}(m_1, m_2, x_3) &:= \frac{1}{a_2} \int_0^{a_2} h^{\text{one}}(m_1, x_2, x_3) \cdot e^{-i2\pi \frac{m_2}{a_2} x_2} dx_2 \\ &= \frac{1}{a_2} \int_0^{a_2} dx_2 \frac{1}{a_1} \int_0^{a_1} dx_1 g(x_1, x_2, x_3) \cdot e^{-i2\pi \left(\frac{m_1}{a_1} x_1 + \frac{m_2}{a_2} x_2\right)} \end{aligned}$$

We can write g once again as:

$$g(x_1, x_2, x_3) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} h^{\text{two}}(m_1, m_2, x_3) \cdot e^{i2\pi \frac{m_1}{a_1} x_1} \cdot e^{i2\pi \frac{m_2}{a_2} x_2}$$

Finally applying the same for the third coordinate, we define:

$$\begin{aligned} h^{\text{three}}(m_1, m_2, m_3) &:= \frac{1}{a_3} \int_0^{a_3} h^{\text{two}}(m_1, m_2, x_3) \cdot e^{-i2\pi \frac{m_3}{a_3} x_3} dx_3 \\ &= \frac{1}{a_3} \int_0^{a_3} dx_3 \frac{1}{a_2} \int_0^{a_2} dx_2 \frac{1}{a_1} \int_0^{a_1} dx_1 g(x_1, x_2, x_3) \cdot e^{-i2\pi \left(\frac{m_1}{a_1} x_1 + \frac{m_2}{a_2} x_2 + \frac{m_3}{a_3} x_3\right)} \end{aligned}$$

We write g as:

$$g(x_1, x_2, x_3) = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} \sum_{m_3=-\infty}^{\infty} h^{\text{three}}(m_1, m_2, m_3) \cdot e^{i2\pi \frac{m_1}{a_1} x_1} \cdot e^{i2\pi \frac{m_2}{a_2} x_2} \cdot e^{i2\pi \frac{m_3}{a_3} x_3}$$

https://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_series

Este tipo de función f puede ser, por ejemplo, el potencial efectivo que un electrón "siente" dentro de un cristal periódico.

Re-arranging:

$$g(x_1, x_2, x_3) = \sum_{m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}} h^{\text{lattice}}(m_1, m_2, m_3) \cdot e^{i2\pi \left(\frac{m_1}{a_1} x_1 + \frac{m_2}{a_2} x_2 + \frac{m_3}{a_3} x_3 \right)}.$$

Now, every reciprocal lattice vector can be written as $\mathbf{K} = l_1 \mathbf{g}_1 + l_2 \mathbf{g}_2 + l_3 \mathbf{g}_3$, where l_i are integers and \mathbf{g}_i are the reciprocal lattice vectors, we can use the fact that $\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ to calculate that for any arbitrary reciprocal lattice vector \mathbf{K} and arbitrary vector in space \mathbf{r} , their scalar product is:

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} = (l_1 \mathbf{g}_1 + l_2 \mathbf{g}_2 + l_3 \mathbf{g}_3) \cdot \left(x_1 \frac{\mathbf{a}_1}{a_1} + x_2 \frac{\mathbf{a}_2}{a_2} + x_3 \frac{\mathbf{a}_3}{a_3} \right) = 2\pi \left(x_1 \frac{l_1}{a_1} + x_2 \frac{l_2}{a_2} + x_3 \frac{l_3}{a_3} \right).$$

And so it is clear that in our expansion, the sum is actually over reciprocal lattice vectors:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} h(\mathbf{K}) \cdot e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}},$$

where

$$h(\mathbf{K}) = \frac{1}{a_3} \int_0^{a_3} dx_3 \frac{1}{a_2} \int_0^{a_2} dx_2 \frac{1}{a_1} \int_0^{a_1} dx_1 f \left(x_1 \frac{\mathbf{a}_1}{a_1} + x_2 \frac{\mathbf{a}_2}{a_2} + x_3 \frac{\mathbf{a}_3}{a_3} \right) \cdot e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}.$$

Assuming

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = x_1 \frac{\mathbf{a}_1}{a_1} + x_2 \frac{\mathbf{a}_2}{a_2} + x_3 \frac{\mathbf{a}_3}{a_3},$$

we can solve this system of three linear equations for x , y , and z in terms of x_1 , x_2 and x_3 in order to calculate the volume element in the original cartesian coordinate system. Once we have x , y , and z in terms of x_1 , x_2 and x_3 , we can calculate the Jacobian determinant:

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x} & \frac{\partial x_1}{\partial y} & \frac{\partial x_1}{\partial z} \\ \frac{\partial x_2}{\partial x} & \frac{\partial x_2}{\partial y} & \frac{\partial x_2}{\partial z} \\ \frac{\partial x_3}{\partial x} & \frac{\partial x_3}{\partial y} & \frac{\partial x_3}{\partial z} \end{vmatrix}$$

which after some calculation and applying some non-trivial cross-product identities can be shown to be equal to:

$$\frac{a_1 a_2 a_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}$$

(it may be advantageous for the sake of simplifying calculations, to work in such a cartesian coordinate system, in which it just so happens that \mathbf{a}_1 is parallel to the x axis, \mathbf{a}_2 lies in the x - y plane, and \mathbf{a}_3 has components of all three axes). The denominator is exactly the volume of the primitive unit cell which is enclosed by the three primitive-vectors \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 and \mathbf{a}_3 . In particular, we now know that

$$dx_1 dx_2 dx_3 = \frac{a_1 a_2 a_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \cdot dx dy dz.$$

We can write now $h(\mathbf{K})$ as an integral with the traditional coordinate system over the volume of the primitive cell, instead of with the x_1 , x_2 and x_3 variables:

$$h(\mathbf{K}) = \frac{1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \int_C d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

And C is the primitive unit cell, thus, $\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ is the volume of the primitive unit cell.

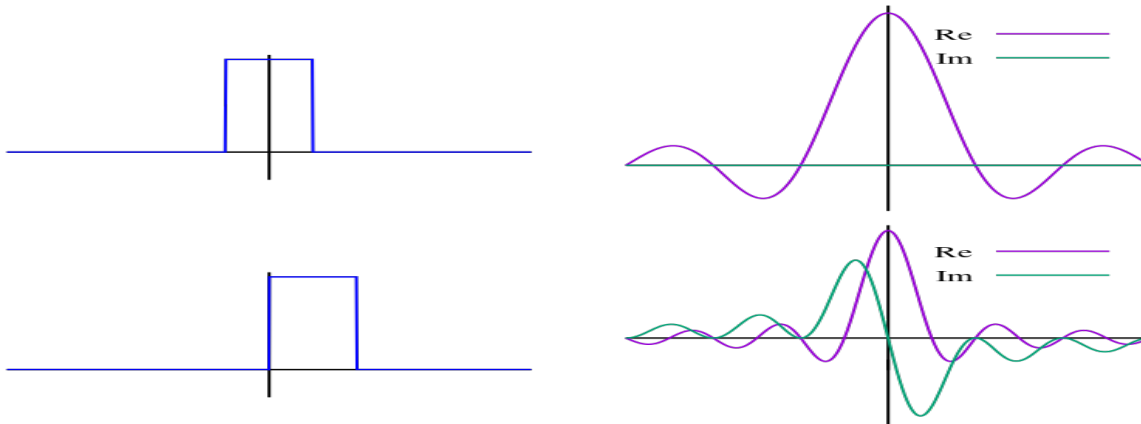
$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} h(\mathbf{K}) \cdot e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}},$$

Siendo \mathbf{K} la red dual y su intensidad

$$h(\mathbf{K}) = \frac{1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \int_C d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

C es la celda primitiva
(aparece su volumen en el divisor)

Transformada de Fourier sobre C

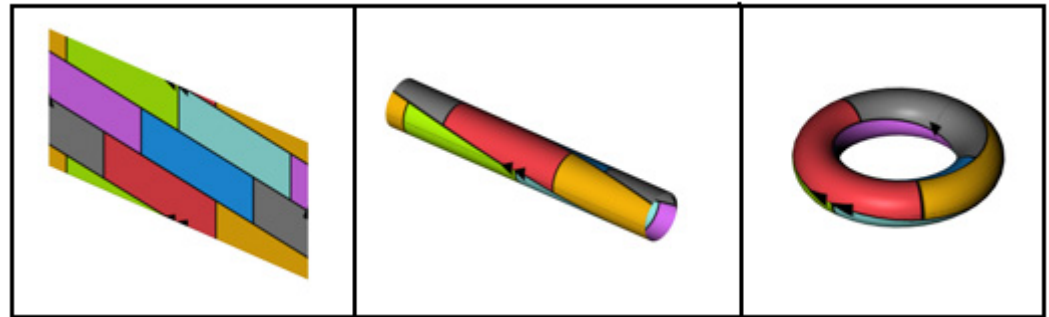
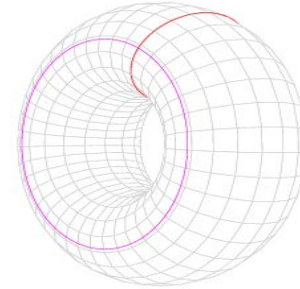


La periodicidad en la repetición de la celda primitiva C conduce a idealizarla (y representarla) mediante un **Toro tridimensional**

En n dimensiones:

$$\mathbb{T}^n = S^1 \times S^1 \times \cdots \times S^1$$

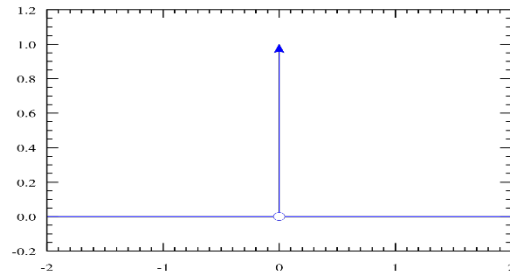
- el “toro a la 1” es precisamente la circunferencia: S^1 .
- el $\mathbb{T}^2 = S^1 \times S^1$ es el “toro a la 2”,
- el “toro a la 3” puede considerarse como $\mathbb{T}^2 \times S^1$, esto es como el **producto cartesiano** del dos-toro por la circunferencia.
- generalizando, el *toro a la n* potencia puede describirse como el cociente de \mathbf{R}^n con desplazamientos enteros sobre cualquier coordenada.



Ahora idealizamos aún mas las cosas entendiendo la función de la red como una suma de *Deltas de Dirac* concentradas en sus puntos

La “delta de Dirac” (P. A. M. Dirac, 1902-1984)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$



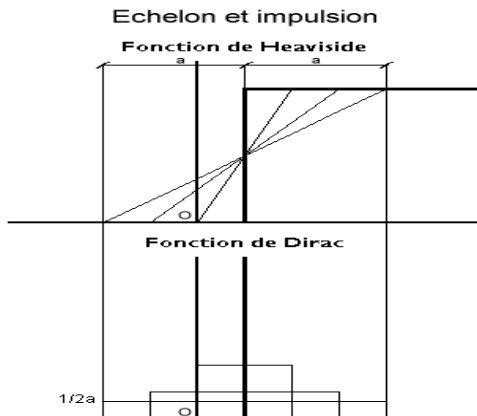
No es una función estrictamente hablando, puesto requeriría tomar valores infinitos

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & x = 0; \\ 0, & x \neq 0; \end{cases}$$

De hecho

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a)$$

Definición como límite de sucesiones de funciones:



$$H_a(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq -a \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{x}{a}\right) & \text{si } -a < x < a \\ 1 & \text{si } x \geq a \end{cases}$$

$$\lim_{a \rightarrow 0^+} H'_a = \delta$$