Report on the *IHES* Workshop on Mathematical Crystallography

by Marjorie Senechal

Topologie structurale #11, 1985

Compte rendu sur l'atelier de l'*IHES* sur la cristallographie mathématique

Un atelier international sur la cristallographie mathématique d'une durée d'un mois a eu lieu à l'*Institut des hautes études scientifiques* (IHES), à Bures-sur-Yvette, en France, en janvier 1985. Organisé par le professeur Louis Michel, physicien et membre permanent de l'Institut, l'atelier avait pour principal objectif de rassembler des mathématiciens, des physiciens et des cristallographes pour discuter certains des problèmes fondamentaux dans ce domaine. Les conférenciers, qui vinrent de sept pays, séjournèrent à l'Institut pour des périodes variant de cinq jours à tout le mois; les autres participants à l'atelier, qui était ouvert à tous, étaient des enseignants des universités et des instituts des environs. Une journée de chaque semaine (les 4, 10, 17, 24 et 31 janvier) était réservée à la présentation de deux ou trois conférences; le reste du temps, les participants discutèrent des problèmes, poursuivirent leurs propres recherches, ou profitèrent de la proximité de Paris pour le visiter. L'atmosphère était détendue et les discussions très stimulantes; ce fut en somme un véritable atelier.

Les conférences du 4 janvier, les premières, étaient de nature à remplir leur rôle d'introduction: Marjorie Senechal (E.U.) ouvrit l'atelier avec *Introduction to mathematical crystallography*, un exposé sur l'histoire de la question et son état actuel; Louis Michel la suivit et parla de *Crystallography in* n *dimensions*. Geoffrey Shephard (Royaume-Uni), le premier conférencier du 10 janvier, fit un exposé sur *The classification of patterns with respect to symmetry*. Hans Raszillier (R.F.A.), le conférencier suivant, parla de *Crystallography in quantum mechanical spectral problems*. La troisième conférence de la journée fut aussi de G.C. Shephard et porta sur *The aperiodic tilings of Penrose and Amman*. Les trois conférences du 17 janvier furent *Laminated lattices* de John H. Conway (Royaume-Uni),

Structural Topology #11, 1985

A month-long international workshop on mathematical crystallography was held at the *Institut des Hautes Etudes Scientifiques* (IHES), in Bures-sur-Yvette, France, in January 1985. Organized by Professor Louis Michel, a physicist and permanent member of the Institute, the purpose of the workshop was to bring together mathematicians, physicists, and crystallographers to discuss some of the fundamental problems in the field. The speakers, who came from seven countries, stayed at the Institute for varying lengths of time, from five days to the entire month; the other participants in the workshop — which was open to everyone — were faculty members of nearby universities and institutes. There were two or three lectures on one day each week (January 4, 10, 17, 24, 31); during the rest of the time the participants discussed problems, did their own research, and visited nearby Paris. The atmosphere was informal and the discussions very stimulating; it was a workshop that really was one.

The first lectures, on January 4, were introductory: Marjorie Senechal (USA) opened the workshop with an historical-expository talk, *Introduction to Mathematical Crystallography*; she was followed by Louis Michel, who spoke on *Crystallography in* n *Dimensions*. Geoffrey Shephard (UK) was the first speaker on January 10, with a lecture on *The Classification of Patterns with Respect to Symmetry*. The next speaker was Hans Raszillier (FRG), who spoke on *Crystallography in Quantum Mechanical Spectral Problems*. The third lecture was also by Shephard: *The Aperiodic Tilings of Penrose and Amman*. The three lectures on January 17 were *Laminated Lattices* by John H. Conway (UK), *Modulated Crystals* by Aloysio Janner (Netherlands) and *Conjugation Classes of Crystallographic*

Modulated crystals d'Aloysio Janner (Pays-Bas) et *Conjugation classes of crystallographic groups* de Jan Mozrzymas (Pologne). J.H. Conway donna aussi le lendemain une conférence sur les pavages apériodiques qui n'était pas inscrite au programme. Le 24 janvier, Peter Engel (Suisse) prononça deux conférences, d'abord *On the uniqueness of crystal structure analysis*, puis *Geometrical crystallography*. Entre ces deux exposés, Denis Gratias (France) parla de *Discovery of quasi-crystals with icosahedral symmetry*. (Daniel Schectman (Israël) et J.W. Cahn (E.U.), deux des trois chercheurs qui ont fait cette découverte, étaient aussi présents.) La session du 31 janvier, la dernière de l'atelier, comprit un exposé d'André Katz (France) sur les travaux qu'il a accomplis avec Michel Duneau, *Étude et généralisation des pavages de Penrose*, un exposé de Pierre Cartier (France) intitulé *Bravais lattices of Coxeter groups*, et une discussion présidée par Louis Michel et qui porta sur les problèmes non résolus et toutes les conférences du mois.

Bien que les titres laissent présager une grande variété, ces conférences peuvent cependant être regroupées autour de quelques thèmes fondamentaux. Ainsi la conférence de L. Michel et la première conférence de G.C. Shephard touchèrent à certains aspects du problème de l'unification et de la clarification des bases de la cristallographie mathématique; H. Raszillier parla d'une application insolite des groupes cristallographiques; et la première conférence de J.H. Conway ainsi que les exposés de J. Mozrzymas et de P. Cartier traitèrent de certains aspects théoriques des groupes cristallographiques à n dimensions. La première conférence de P. Engel toucha à l'interprétation des diagrammes de diffraction des rayons X, alors que sa seconde fit le point sur ses calculs par ordinateur des régions de Dirichlet des réseaux à quatre dimensions et sur ses travaux récents sur les conditions locales (quasi voisines) qui assurent l'obtention de pavages isoédriques dans l'espace à n dimensions. Rétrospectivement, on peut dire que ces huit conférences ont fourni le contexte requis pour comprendre les autres exposés, lesquels touchaient à ce qui peut être appelé la cristallographie généralisée.

Au lieu de décrire ces derniers un à un, nous allons tenter de résumer quelques-unes des notions de base communiquées par l'ensemble des sept exposés. Mais d'abord, un peu d'histoire. La cristallographie mathématique débuta au commencement des années 1800, lorsque R.J. Haüy, un cristallographe français, proposa un modèle de la structure cristalline qui impliquait une relation plausible entre l'arrangement des atomes d'un cristal et la forme externe du cristal. Haüy supposa que chaque cristal est composé d'un très grand nombre de polyèdres congruents extrêmement petits qui sont empilés d'une façon prédéterminée pour former ce cristal. Les diverses formes que présentent les cristaux d'une même espèce sont produites en terminant ces empilements de différentes façons. Une conséquence importante de ce modèle est qu'un cristal (ainsi défini) doit avoir la forme d'un polyèdre rationnel. Il en découle qu'un cristal ne peut admettre comme symétrie de rotation que celles d'ordre 2, 3, 4 et 6. Les polyèdres de Haüy, dont l'existence était douteuse, furent vite remplacés par leurs centres, qu'on supposa disposés sur les noeuds d'un réseau tridimensionnel. Depuis lors et jusqu'à nos jours, il fut admis en cristallographie que les atomes d'un cristal sont situés sur un nombre fini de réseaux identiques s'interpénétrant. Environ cent ans après Haüy, cet axiome fut appuyé par les résultats d'expériences sur la diffraction des rayons X, et il est demeuré depuis la pierre angulaire de la cristallographie, à tel point que le réseau est souvent considéré comme la caractéristique qui définit un cristal. Par conséquent, la cristallographie mathématique

Groups by Jan Mozrzymas (Poland). Conway also gave an unscheduled lecture the next day on aperiodic tilings. On January 24, Peter Engel (Switzerland) spoke twice, first *On the Uniqueness of Crystal Structure Analysis* and later on *Geometrical Crystallography*. In between these talks, Denis Gratias (France) talked about the *Discovery of Quasi-Crystals with Icosahedral Symmetry*. (Two of the three co-discoverers, Daniel Schectman (Israel) and J.W. Cahn (USA) were also present.) The final session of the workshop, January 31, included a lecture by André Katz (France) on his work with Michel Duneau, *Étude et généralisation des pavages de Penrose*, a lecture on *Bravais Lattices of Coxeter Groups* by Pierre Cartier (France) and a discussion of the lectures of the month and open problems, led by Louis Michel.

Despite the variety of titles, the lectures can be grouped together around a few basic themes. Thus Michel's lecture, and Shephard's first lecture were concerned with aspects of the problem of unifying and clarifying the foundations of mathematical crystallography; Raszillier spoke on an unusual application of the crystallographic groups; and Conway's first lecture and the talks by Mozrzymas and Cartier dealt with some theoretical aspects of n-dimensional crystallographic groups. Engel's first lecture concerned the interpretation of x-ray diffraction patterns, while in the second he summarized his computer computations of the Dirichlet regions of the four-dimensional lattices and recent work on the local (near neighbor) conditions that ensure the isohedrality of tilings in n-dimensional space. In retrospect one could say that these eight lectures provided a prerequisite context for the rest of the talks, which were concerned with what may be called generalized crystallography.

Rather than describe each of them, I will try to summarize some of the basic ideas which these seven collectively conveyed. First, a bit of history. Mathematical crystallography began in the early 1800's when the French crystallographer R.J. Haüy proposed a model for crystal structure which exhibited a plausible relation between a crystal's atomic pattern and its external shape. Haüy assumed that each crystal is composed of a great many extremely small congruent polyhedra, which are stacked together in a prescribed way to form the crystal. The different shapes that crystals of the same species can assume are the result of finishing off the stack in various ways. One important consequence of this model is that a crystal (so defined) must be a rational polyhedron. From this it follows that the rotational symmetry of a crystal can only be 2-, 3-, 4-, or 6-fold. Haüy's blocks, which were of doubtful reality, were soon replaced by their centers, and these points were assumed to lie at the nodes of a three-dimensional lattice. From then until now, it has been axiomatic in crystallography that the atoms of a crystal are situated in a finite number of identical interpenetrating lattices. Experimental support for this axiom was obtained by x-ray diffraction about one hundred years after Haüy, and it has remained the cornerstone of crystallography — indeed, the lattice is often taken as the defining characteristic of a crystal. Consequently, mathematical crystallography has been the study of the geometric and algebraic properties of multiple lattice configurations (regular systems of points).

fut l'étude des propriétés géométriques et algébriques des configurations constituées de multiples réseaux (systèmes réguliers de points).

Revenons maintenant à l'atelier de l'*IHES*. Récemment, certains cristaux non conformes au modèle classique ont été découverts. D'abord, il a été admis depuis plusieurs années qu'il existe des cristaux (appelés cristaux modulés) dont les réseaux constituants ne sont pas congruents, voire quelquefois pas même coétendus. Puis, en novembre 1984, les «lois» de la cristallographie furent à nouveau ébranlées par l'annonce de la découverte de cristaux affichant une symétrie de rotation d'ordre 5. Cette symétrie est clairement visible non seulement à l'échelle macroscopique, mais aussi sur les diagrammes de diffraction des rayons X. L'existence même de ces diagrammes indique que ces cristaux (qui sont des alliages d'aluminium et de manganèse) possèdent une structure atomique très bien ordonnée. Cette structure n'a pas encore été déchiffrée, mais il est évident qu'elle ne correspond pas à un réseau.

Les nouveaux cristaux «icosaédriques» ont soulevé une multitude de questions en physique, en cristallographie et en mathématiques. La plus pertinente de ces questions est: sommes-nous en mesure d'élargir nos notions d'ordre de façon à les rendre applicables aux structures de ces alliages et des cristaux constitués de réseaux non coétendus aussi bien qu'aux structures «normales»? Évidemment, il faudra un certain temps pour trouver une réponse satisfaisante. En attendant, les pavages apériodiques revêtent une importance accrue, puisque les pavages du plan par les cerfs-volants et les fléchettes de Penrose, et par les losanges de Penrose possèdent une symétrie locale d'ordre 5 pour toute région de taille raisonnable, et que de plus un diagramme de diffraction optique produit il y a quelques années à partir d'un arrangement de losanges de Penrose exhiba un ensemble discret de points possédant une parfaite symétrie d'ordre 5!

Les tuiles de Penrose peuvent-elles nous mener à un concept généralisé de la symétrie? Dans quelle direction devrions-nous chercher cette généralisation? À l'atelier, J.H. Conway et G.C. Shephard mirent en évidence le rôle fondamental que jouent certaines droites, appelées barres d'Amman, dans les pavages de Penrose. Il est acquis que, dans les pavages de Penrose, les cerfs-volants et les fléchettes (ou les losanges) doivent satisfaire certaines conditions d'assemblage. Les juxtapositions permises peuvent être spécifiées de différentes manières à l'aide de sommets, de rainures ou de marques de différentes couleurs. Une de ces manières consiste à tracer sur les tuiles des barres qui se joignent et forment des droites qui se prolongent à l'infini à travers le pavage. S'il est fait abstraction des tuiles et si la configuration des droites est étudiée, il apparaît que ces droites constituent cinq familles de droites parallèles inclinées les unes par rapport aux autres à des angles qui sont des multiples de $2\pi/5$. À l'intérieur de chaque famille, l'intervalle entre deux droites consécutives est soit long (L), soit court (S), et le rapport $L/S = \tau$, τ étant le fameux nombre «d'or», soit $(1 + \sqrt{5})/2$. La suite des intervalles n'est pas périodique, mais elle n'est pas arbitraire non plus: elle s'apparente beaucoup à la suite des différences entre les termes consécutifs de la suite $\{[n\tau]\}$, où $[x]$ désigne la partie entière de x et n parcourt les entiers. Ensemble, ces familles de lignes suggèrent l'existence d'un réseau, mais leurs droites ne sont pas équidistantes, et leurs pavages affichent la symétrie

To return to the *IHES* workshop: recently some crystals which do not fit the classical model have been discovered. First, it has been recognized for several years that there are crystals (called modulated crystals) whose constituent lattices are not congruent — sometimes they are not even commensurate. Then in November 1984, the "laws" of crystallography were dealt another blow by the announcement of the discovery of crystals with 5-fold rotational symmetry. This symmetry is not only macroscopicaly visible, it is also clearly seen in x-ray diffraction patterns. The very existence of these patterns indicates that the crystals (which are alloys of aluminum and manganese) have a highly ordered atomic structure. This structure has not yet been deciphered, but clearly it cannot be that of a lattice.

The new "icosahedral" crystals raise a great many questions for physics, crystallography, and mathematics. The question that is most relevant here is: can we extend our ideas of order to include the structure of these alloys and incommensurate crystals as well as the "normal" ones? Evidently it will take some time to answer this in a completely satisfactory way. In the meantime, aperiodic tilings are taking on new significance, because the tilings of the plane by Penrose kites and darts, and by Penrose rhombs, have local 5-fold symmetry in every reasonably sized region and moreover an optical diffraction pattern made several years ago from a pattern of Penrose rhombs showed a discrete set of points with perfect 5-fold symmetry!

Can the Penrose tiles lead us to a concept of generalized symmetry? In which direction shall we look for this generalization? At the workshop, Conway and Shephard emphasized the fundamental role that certain lines, called Amman bars, play in the Penrose tilings. Remember that in a Penrose tiling the kites and darts (or the rhombs) must satisfy certain matching conditions. The allowed juxtapositions can be specified in various ways: by colored vertices, indentations, or markings on the tiles. One way of marking the tiles is with bars which meet to form straight lines which extend across the infinite tiling. If we then disregard the tiles and study the configuration of lines, we find that they comprise five families of parallel lines, mutually inclined at angles which are multiples of $2\pi/5$. Within each family, the spacing between successive lines is either "Long" or "Short", with the ratio $L/S = \tau$, where τ is the famous "golden" number $(1 + \sqrt{5})/2$. The sequence of spacings is not periodic, but neither is it arbitrary: it is closely related to the sequence of differences between successive terms of the sequence $\{[n\tau]\}$, where $[\ ]$ denotes the greatest integer function and n runs through the integers. Taken together, these families of lines are suggestive of a lattice, but they are not equispaced, and they exhibit the forbidden local 5-fold symmetry of the tilings. (For pictures and more details, see *Tilings and Patterns* by Branko Grünbaum and G.C. Shephard, which will be published by *Freeman* later this year.)

locale d'ordre 5, ce qui est interdit. (Pour des illustrations et plus de détails, consulter *Tilings and patterns* de Branko Grünbaum et G.C. Shephard qui sera publié plus tard cette année chez *Freeman*.)

Une toute autre approche à la généralisation de la symétrie fut esquissée par A. Katz et M. Duneau qui démontrèrent que non seulement les pavages de Penrose (par les losanges) mais aussi des analogues tridimensionnels de ces pavages, ainsi que d'autres pavages non périodiques plus généraux peuvent être obtenus en effectuant des projections de sections de réseaux entiers de dimension supérieure. (Un pavage à une dimension dont les sommets sont disposés à des intervalles correspondant à la suite décrite plus tôt peut aussi être obtenu par cette méthode.) Il est intéressant de noter que, pour les pavages tridimensionnels générés par cette méthode, les diagrammes de diffraction des sommets obtenus par calculs théoriques correspondent assez bien à ceux obtenus expérimentalement pour les cristaux icosaédriques. De plus, comme l'expliqua A. Janner, les groupes cristallographiques de dimension supérieure sont aussi utilisés avec succès pour analyser la symétrie des cristaux constitués de réseaux non coétendus.

La question peut être reformulée comme suit: existe-t-il une théorie généralisée de la symétrie qui définisse la structure des cristaux icosaédriques, qui s'applique aux pavages apériodiques, et qui englobe les lois de la cristallographie classique comme cas spéciaux?

L'atelier se termina dans une atmosphère d'enthousiasme général devant le défi lancé par les problèmes qui venaient d'être exposés. Ce compte rendu doit aussi se terminer. Une discussion plus détaillée de l'atelier, accompagnée de références, peut être obtenue de l'*IHES* (demander la pré-impression de *Introduction to mathematical crystallography*).

Ce fut un privilège de participer à cet excellent atelier. Tous furent satisfaits de l'information transmise, de la valeur des discussions, et de la découverte de nouveaux problèmes d'intérêt commun. Les plus sincères remerciements doivent être adressés à l'*IHES*, et tout spécialement à Louis et Thérèse Michel, pour ce splendide atelier et leur généreuse hospitalité.

Adresse de l'auteur:

Marjorie Senechal
Department of Mathematics
Clark Sciences Center
Smith College
Northampton, Massachusetts 01063, USA

A quite different approach to generalized symmetry was outlined by Katz and Duneau, who showed that not only the Penrose tilings (by rhombs) but also three-dimensional analogues of these tilings, and other, more general, non periodic tilings can be obtained as projections of sections of higher dimensional integer lattices. (A one-dimensional tiling whose vertices are spaced according to the sequence described above can also be obtained by this method.) Interestingly, theoretical calculations of the diffraction pattern of the vertices of the three-dimensional tilings obtained by this method are in good agreement with the experimental data obtained for the icosahedral crystals. Moreover, as Janner explained, higher dimensional crystallographic groups are also being used successfully to analyze the symmetry of incomensurate crystals.

Let us restate our question: is there a theory of generalized symmetry that characterizes the structure of the icosahedral crystals, accounts for aperiodic tilings, and includes the laws of classical crystallography as special cases?

The workshop ended in a mood of general enthusiasm about the challenging problems that had been posed. This report has to end as well. A more detailed discussion of the workshop, together with references, can be obtained from *IHES* (ask for the preprint *Introduction to Mathematical Crystallography*).

It was a privilege to participate in this excellent workshop. Every one was pleased with the information conveyed, the worthwhile discussions, and the evolution of new problems of mutual interest. Thanks are due to *IHES*, and especially to Louis and Thérèse Michel, for the splendid workshop and their generous hospitality.

Address of the author:

Marjorie Senechal
Department of Mathematics
Clark Sciences Center
Smith College
Northampton, Massachusetts 01063, USA