



REDES NÃO CRISTALOGRÁFICAS

Montauban Moreira de Oliveira Júnior

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia de Produção, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Produção.

Orientadores: Jean-Guillaume Eon
Nair Maria Maia de Abreu

Rio de Janeiro
Novembro de 2013

REDES NÃO CRISTALOGRÁFICAS

Montauban Moreira de Oliveira Júnior

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA DE PRODUÇÃO.

Examinada por:

Prof. Nair Maria Maia de Abreu, D.Sc.

Prof. Jean-Guillaume Eon, Docteur d'Etat

Prof. Maria Agueiras Alvarez de Freitas, D.Sc.

Prof. Márcia Rosana Cerioli, D.Sc.

Prof. Davide Maria Proserpio, Dottore in Chimica

Prof. Rafael Bernardo Teixeira, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

NOVEMBRO DE 2013

Oliveira Júnior, Montauban Moreira de
Redes não Cristalográficas/Montauban Moreira de
Oliveira Júnior. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.
XX, 152 p.: il.; 29,7cm.
Orientadores: Jean-Guillaume Eon
Nair Maria Maia de Abreu
Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia de Produção, 2013.
Referências Bibliográficas: p. 145 – 147.
1. non-crystallographic nets. 2. periodic nets.
3. bounded automorphisms. I. Eon, Jean-Guillaume
et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia de Produção. III. Título.

*Dedico este trabalho à Simone e
ao Miguel.*

Agradecimentos

Agradeço, por contribuição direta ou indireta neste difícil trabalho:

Ao meu pai, Montauban, pelas belas lembranças de família que tenho. À minha mãe, Jurema, por me ajudar sempre, e incondicionalmente. À minha avó, Generita, por tudo que já fez e ainda faz por mim.

A meu irmão, Márcio, pela amizade profunda e companherismo. À minha irmã, Mônica, pela amizade, por me estimular e me dar forças nos momentos complicados.

Ao meu amigo, Manildo, pela grande amizade de longa data. Ao meu irmão, Alex, e à D. Miltes, pela amizade verdadeira em todos os momentos, desde a Santarém. Ao meu amigo André, pela imensa amizade desde a época do Street.

Aos meus sobrinhos, Fred, Filipe e Vítor, por aquela amizade tão forte e natural, que só vendo pra entender. Ao Banto e ao Milo, meus amigos, pelo companherismo.

Aos meus companheiros da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, pelo apoio nesta jornada. Aos meus amigos de doutorado, pela união e pelo apoio mútuo. Aos meus amigos do Cederj, Reginaldo, Carlos Eduardo, Fabiano e Eduardo, pela grande amizade.

Ao meu professor Antonio Olavo da Silva Neto, um agradecimento especial, por ter me apresentado a matemática não trivial e por ter me motivado brilhantemente a seguir este caminho difícil.

Aos companheiros de infância Ryu e Ken, por lutarem por mim em várias situações.

À Nair, por me apoiar, ensinar e guiar em momentos fundamentais deste caminho.

Ao meu professor Jean-Guillaume Eon, pelo comprometimento incrível com o nosso trabalho, pelo brilhantismo na difícil arte de ensinar pessoas, e na mais difícil ainda arte de ensinar pessoas a ter autonomia. Agradeço também pela amizade que surgiu ao longo destes anos.

Ao meu filho Miguel, um agradecimento especial por existir, sorrir, por ser tão especial, tão incrível.

E agradeço à minha mulher, Simone, por estar sempre ao meu lado, em cada segundo.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

REDES NÃO CRISTALOGRÁFICAS

Montauban Moreira de Oliveira Júnior

Novembro/2013

Orientadores: Jean-Guillaume Eon

Nair Maria Maia de Abreu

Programa: Engenharia de Produção

O objetivo deste trabalho é demonstrar que representações baricêntricas de redes não cristalográficas (abreviadamente, redes NC) sempre apresentam colisões de vértices, e que os grafos quociente destas redes sempre admitem uma partição equivoltagem, o que será chamado de Teorema Fundamental das Redes NC. Em paralelo, descrever completamente os grupos de automorfismos limitados de tais redes. Depois dos três capítulos que introduzem conceitos fundamentais, são estudadas redes NC com grupos de automorfismos limitados não abelianos com ação livre; a natureza particularmente mais simples de tais automorfismos permite a criação de um procedimento para a geração de exemplos não triviais de redes NC. No capítulo seguinte, demonstra-se que representações baricêntricas de redes NC que admitem um sistema de imprimitividade com blocos finitos para automorfismos limitados sempre apresentam colisões de vértices em sua representação baricêntrica e admitem grafos quociente com uma partição equivoltagem. No capítulo final, demonstra-se que toda rede NC admite tal sistema de imprimitividade, o que conclui o objetivo primário do trabalho. Ao longo do estudo são desenvolvidas importantes ferramentas, como as partições equivoltagem, os grupos de correlação e os grafos fibra. São desenvolvidos também teoremas sobre representações limitadas. Os grupos de automorfismos limitados das redes NC são completamente descritos como produtos subdiretos de produtos entrelaçados de grupos mais simples.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

NON-CRYSTALLOGRAPHIC NETS

Montauban Moreira de Oliveira Júnior

November/2013

Advisors: Jean-Guillaume Eon

Nair Maria Maia de Abreu

Department: Production Engineering

The goal of this text is to prove that barycentric representations of non crystallographic nets (shortly, NC nets) always present vertex collisions, and that the quotient graphs of such nets always an equivoltage partition, which will be called The Fundamental Theorem of NC Nets. In parallel, to describe completely the bounded automorphism groups of such nets. After the first three chapters introducing the basic concepts, NC nets with freely-acting non abelian bounded automorphism groups are studied; the particularly simple nature of such automorphisms leads to the creation of a procedure of generation of non-trivial NC nets. In the next chapter, it is proved that barycentric representations of NC nets admitting a system of imprimitivity with finite blocks for bounded automorphisms always display vertex collisions in their barycentric representations and admit quotient graphs with an equivoltage partition. In the final chapter, it is proved that all NC nets admit such a system of imprimitivity, which concludes the main objective of the study. Important tools are developed, such as equivoltage partitions, correlation groups and fibre graphs. Theorems about bounded representations are developed. The bounded automorphism groups of NC nets are completely described as subdirect products of wreath products of simpler groups.

Sumário

Lista de Figuras	xi
I Revisão Bibliográfica	1
1 Introdução	2
2 Conceitos de Teoria de Grupos	7
2.1 Primeiros Conceitos	7
2.2 Imprimitividade	15
2.3 Produtos	16
3 Conceitos de Teoria de Grafos	21
3.1 Primeiros Conceitos	21
3.2 Ciclos e Cociclos	25
3.3 Automorfismos de Grafos	27
4 Conceitos de Redes Periódicas	32
4.1 Redes Periódicas e Representações	32
4.2 Grafos Quociente e Grafos de Voltagem	39
4.3 Fibras Geodésicas	46
4.4 Representações Baricêntricas	51
4.5 Matrizes	55
II Redes Não Cristalográficas	60
5 Introduzindo Redes Não Cristalográficas	61
6 Redes NC com grupos de automorfismos limitados não abelianos que atuam livremente	66
6.1 Principais Resultados	66
6.2 Geração de redes NC	69

6.2.1	B_2 com voltagens (1,2) e (1,2,3) em \mathcal{S}_3	69
6.2.2	B_2 com voltagens (1,2) e (1,3) em \mathcal{S}_3	77
6.2.3	$K_2^{(3)}$ com voltagens e, (1,2) e (1,3) em \mathcal{S}_3	82
6.3	Geração direta de redes não cristalográficas	86
6.4	Considerações Adicionais	91
7	Redes com Blocos Finitos de Imprimitividade para Grupos de Automorfismos Limitados	95
7.1	Introdução	95
7.2	Vetores Representação e Representações Limitadas	96
7.3	Imprimitividade em Redes Periódicas	100
7.4	Grupos de Automorfismos Limitados e Sistemas de Imprimitividade	101
7.5	Partições Equivoltagem	103
7.5.1	A Escada Dupla	106
7.5.2	As redes NC uld e uld-z	107
7.5.3	Um duplo hcb	108
7.5.4	Um triplo sql	108
7.5.5	Uma rede periódica baseada no grafo de Frucht	111
7.6	Grupos de Correlação	113
7.6.1	Um triplo hcb	115
7.6.2	Grades 1-periódicas	116
7.6.3	O duplo hcb	118
7.7	Algoritmo	119
7.8	Aplicação: Três Empacotamentos Esféricos Ortorrômnicos	120
7.8.1	4/4/o19	121
7.8.2	4/4/o18 e 5/3/o6	121
7.9	Considerações Adicionais	124
8	Caracterização de Redes NC	125
8.1	Introdução	125
8.2	Redes Reticulares	126
8.3	Grafos Fibra	126
8.4	Automorfismos Limitados de Ordem Finita em Grades 1-Periódicas	131
8.5	Automorfismos Limitados de Ordem Finita em Grades p -periódicas	135
8.6	Teorema Fundamental das Redes Não Cristalográficas	136
8.6.1	Redes NC com vértices fixos	136
8.6.2	Redes NC com arestas fixas	137
8.6.3	Redes NC com automorfismos limitados com ação livre	137
8.7	A estrutura do grupo de automorfismos limitados	138
8.8	Uma rede NC simples baseada em nbo	139

8.9	Considerações Adicionais	141
9	Conclusões	142
9.1	Resultados	142
9.2	Sugestões para pesquisas futuras	143
	Referências Bibliográficas	145
A	Convergência de permutações em \mathbb{Z}	148
	Índice Remissivo	150

Lista de Figuras

1.1	À esquerda uma imagem real da estrutura cristalina do grafeno, e à direita um grafo infinito que a representa [1].	3
1.2	A figura da esquerda apresenta menos simetrias do que a intermediária, que por sua vez apresenta menos simetrias que a da direita, embora todas as três representem o mesmo grafo abstrato.	3
1.3	Em (a), cada célula representando 1 bit: uma reflexão local (A_1, B_1) cria as configurações para as informações zero e um. Em (b), uma configuração bidimensional semelhante.	6
2.1	Uma representação gráfica do grupo $\mathcal{H}_2 = (\mathbb{Z}^2, +)$ e de dois subgrupos: em azul, $\Lambda_x = \{(x, 0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e em vermelho, $\Lambda_y = \{(0, y) : y \in \mathbb{Z}\}$. Em verde a interseção $\{e\} = \Lambda_x \cap \Lambda_y$	8
2.2	Em cada um dos dois exemplos, cada cor representa uma órbita.	11
2.3	Dois subgrupos isomorfos de $(\mathbb{Z}^2, +)$: em vermelho, $\Lambda_{(x,0)} = \{(x, 0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e em azul, $\Lambda_{(x,x)} = \{(x, x) : x \in \mathbb{Z}\}$. A origem, em verde, é identidade em ambos.	13
2.4	O conjunto \mathbb{Z}^2 admite uma partição σ em 4 blocos infinitos de imprimitividade, representados pelas 4 cores diferentes na Figura.	16
2.5	Observe a sequência infinita de pontos em (a). Algumas aplicações possíveis estão em destaque em (b). Em (c), destacadas duas aplicações: (t_3, f_0) , que leva B_0 em A_3 e (t_2, f_3) , que leva A_3 em B_5 . Em (d), (e) e (f) mais exemplos de produto semidiretos.	19
3.1	Um grafo finito em (a) e um grafo infinito em (b). Em destaque, alguns subgrafos.	22
3.2	Respectivamente, os buquês B_3 e B_2 , o grafos $K_2^{(3)}$ e $K_2^{(4)}$	23
3.3	Entre A e B pode-se ver em preto um passeio que não é um caminho, pois se cruza em C ; em amarelo, um caminho. Em verde, uma geodésica. Como o comprimento da geodésica é 8, esta é a distância entre A e B	23

3.4	Estrelas e bolas centradas nos vértices azuis. Em (a), três estrelas. Em (b), duas bolas de raio 2 (verde e amarelo) e uma estrela (vermelho).	24
3.5	Respectivamente, os ciclos C_3 e C_4 , e os grafos $C_3^{(3)}$ e $C_4^{(2)}$.	24
3.6	Respectivamente, os grafos $K_{1,2}$, $K_{2,2}$ e $K_{2,3}$.	25
3.7	O grafo $K_2^{(3)}$ em (a), o buquê B_2 em (f) e exemplos de ciclos e cociclos.	27
3.8	Respectivamente, um grafo com uma orientação, exemplos de cociclos e exemplos de ciclos.	27
3.9	Exemplos de automorfismos: em (a), ψ possui um vértice fixo; em (b), ρ possui um caminho fixo; em (c), t não possui elementos fixos. Em vermelho, os elementos fixados são destacados.	29
3.10	Um automorfismo com um ponto fixo (a) e um automorfismo sem pontos fixos (b) num grafo infinito. Veja que o primeiro não é um automorfismo limitado: as distâncias entre um vértice e sua imagem aumentam conforme aumenta a distância até o ponto fixo.	30
3.11	Exemplos de automorfismos limitados que não possuem ordem infinita: em (a), o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$. Repare que a distância entre um vértice e sua imagem é 1; em (b), pode-se observar (B_i, C_i) , para todo $i \in \mathbb{Z}$ do mesmo tipo de (a), e automorfismos limitados locais (B_1, C_1) , que não podem ocorrer em (a): veja em (c) a cadeia de permutações iniciada por (B_2, C_2) e que culmina convergindo para o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$ quando as trocas se propagam infinitamente em ambos os sentidos.	31
4.1	Exemplos de redes infinitas em (a) e (b). Em (a) a rede quadrada (sql). Em (b) a rede hexagonal (hcb). Duas grades infinitas em (c) e (d).	33
4.2	Algumas estruturas cristalinas, como a faujazita, deveriam ser modeladas por redes que admitem grau 2 em seus vértices. Mas isto pode ser contornado utilizando-se uma contração, sem perdas topológicas [2].	33
4.3	Em (a), as duas estruturas são topologicamente indistinguíveis. Em (b), pode-se ver que na esquerda os automorfismos são mais facilmente identificados, já que há mais simetrias.	34
4.4	A rede hexagonal e direções independentes de translação.	36
4.5	A rede quadrada e a rede hexagonal rotuladas. Em destaque duas direções independentes em cada rede.	37
4.6	Correspondência entre conceitos equivalentes de redes e de representações de redes.	38

4.7	Algumas redes e grades periódicas, bem como os seus respectivos grafos quociente. Em destaque nas redes e grades, alguns subgrafos fundamentais.	40
4.8	O grafo quociente da rede quadrada em dois passos. Primeiro identificando vértices e arestas equivalentes via a translação horizontal, em seguida identificando via a translação vertical.	42
4.9	Em (a), as redes não isomorfas possuem o mesmo grafo quociente. Em (b), orientando e rotulando, consegue-se a unicidade.	43
4.10	Em (a), um quociente finito da rede quadrada obtido a partir de um subgrupo de \mathcal{T} de índice 2. Em (b) e (c) duas escolhas diferentes de origens para os vértice-retículos, gerando grafos escada isomorfas. . .	44
4.11	Três exemplos de um mesmo grafo quociente, mas com voltagens diferentes, gerando três redes diferentes.	44
4.12	Um exemplo onde o buquê B_2 com voltagens é o grafo base e o triângulo com laços é seu grafo derivado.	46
4.13	Exemplo de um grafo base e seu grafo derivado.	47
4.14	Exemplos de quando a composição dos elementos de \mathcal{S}_3 ocorre à direita, no caso da indexação dos vértices do grafo derivado, e de quando a composição ocorre à esquerda, quando buscam-se as imagens dos automorfismos do grupo isomorfo ao \mathcal{S}_3 que atua no grafo derivado. .	48
4.15	Imagens de vários ciclos via automorfismos induzidos pelos elementos 12 e 123 de \mathcal{S}_3 . Repare que 12 atua como uma reflexão, como um espelho; e 123 como uma rotação no sentido horário.	48
4.16	Exemplos de anéis fortes em (a) e (b), e um ciclo gerado pela soma destes anéis em (c). Um exemplo de anel que não é um anel forte pode ser visto em (d).	49
4.17	Alguns grafos infinitos da rede quadrada dupla: (a) um caminho infinito (que claramente não é geodésica), (b) uma geodésica infinita, (c) uma geodésica forte (que é uma fibra), (d) e (e) duas escadas 1-periódicas que são geodesicamente completas, (f) um grafo 1-periódico geodesicamente incompleto cujo grupo de translação é subgrupo de índice 2 do grupo de translação do grafo 1-periódico de (g), que é geodesicamente completo.	50
4.18	Por um mesmo vértice do grafo haltere (bidimensional) não passam fibras geodésicas nas duas direções ao mesmo tempo.	51
4.19	A rede hexagonal derivada do $K_2^{(3)}$	52

4.20	Em (a), uma representação baricêntrica ρ da rede hexagonal cujos segmentos representativos das arestas possuem pesos iguais. Em (b), outra representação baricêntrica ρ' da rede hexagonal, mas o segmento vertical possui peso duas vezes maior do que o peso dos demais. . . .	53
4.21	Representação integral da rede hcb derivada de $K_2^{(3)}$. Repare que os pontos tipo A estão contidos num plano, e os pontos tipo B estão contidos num plano paralelo.	54
4.22	Projetando a representação sobre o espaço ciclo, na direção do espaço cociclo gerado pelo vetor 111.	54
4.23	Grafo haltere e sua rede derivada.	54
4.24	Colisão na representação baricêntrica a partir do grafo haltere.	55
4.25	Coordenadas baricênticas e representação baricêntrica da rede hexagonal.	56
4.26	Em destaque amarelo, dois grafos 1-periódicos e seus quocientes. Em azul, elementos que formam bases para os espaços ciclo e cociclo, em cada caso: no primeiro, espaço ciclo com dimensão 2 e espaço cociclo com dimensão 1; no segundo, espaço ciclo com dimensão 4 e espaço cociclo com dimensão 3.	59
5.1	Exemplos de automorfismos limitados diferentes de translações em redes NC.	62
5.2	Uma rede NC cujo grafo quociente não apresenta automorfismos não triviais que preservam a voltagem de ciclos.	63
5.3	Em (a), o automorfismo limitado $\alpha_1 = (B_i, C_i)$ comuta com o grupo de translações. Assim, possui o correspondente (B, C) no grafo quociente. Em (b), o automorfismo local $\alpha_2 = (B_1, C_1)$ claramente não comuta com o grupo de translações. Em (c), o grafo quociente.	64
5.4	Grafos 1-periódicos que admitem blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados. Os blocos aparecem destaque.	65
6.1	Uma rede periódica N , seus diferentes grafos quociente e suas projeções.	67
6.2	Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2 . Os rótulos das arestas são dados entre parênteses.	70
6.3	Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.	71
6.4	Algumas imagens de ciclos por ações de ϕ_{12} e ϕ_{123} . Estes exemplos já foram vistos na Figura 4.15.	71
6.5	Uma representação da rede N derivada de D . Esta representação é muito confusa, uma melhor representação está na Figura 6.6.	72

6.6	Uma representação da rede NC derivada do grafo de voltagem dado na Figura 6.2. Os vértices que colidem nas representações baricêntricas foram segregados no interior de círculos negros e formam duas classes: $\{A, B, C\}$ e $\{D, E, F\}$	73
6.7	O quociente N/\mathcal{T} da rede representada na Figura 6.6, com vértice-órbitas $[A] = \{A, D\}$, $[B] = \{B, E\}$ e $[C] = \{C, F\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade do mesmo em \mathcal{S} , na mesma direção. Vetores de translações ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.	77
6.8	Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2 . Os rótulos das arestas são dados em parênteses. . .	78
6.9	Imagens de ciclos pela ação de 12 em (a) e pela ação de 13 em (b). Em (c) vê-se que a imagem do ciclo externo é o ciclo interno, e vice-versa, tanto pela ação de 12 quanto pela ação de 13.	79
6.10	Uma representação pseudo-baricêntrica da rede NC derivada do grafo de voltagem dado na Figura 6.8. Os vértices que colidem nas representações baricêntricas da rede foram segregados no interior de círculos negros e formam duas classes: $\{A, C, E\}$ e $\{B, D, F\}$	80
6.11	Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.	80
6.12	O quociente N/\mathcal{T} , com vértice-órbitas $[A] = \{A, B\}$, $[C] = \{C, F\}$ e $[D] = \{D, E\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade do mesmo em \mathcal{S} , na mesma direção. Vetores de translações ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.	81
6.13	Duas redes NC não isomorfas. Observe que o subgrafo infinito verde destacado de uma não existe na outra.	82
6.14	Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2	83
6.15	Imagens de ciclos pela ação de 12 em (a) e pela ação de 13 em (b). Em (c) pode-se ver que a imagem do ciclo externo é o ciclo interno, e vice-versa, tanto pela ação de 12 quanto pela ação de 13.	84
6.16	Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.	84
6.17	O quociente N/\mathcal{T} , com vértice órbitas $[A] = \{A, J\}$, $[B] = \{B, K\}$, $[C] = \{C, L\}$, $[D] = \{D, G\}$, $[E] = \{H, E\}$ e $[I] = \{I, F\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade daquele de \mathcal{S} na mesma direção; os vetores translação ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.	85

6.18	Uma representação pseudo-baricêntrica da rede NC derivada do grafo de voltagem dado na Figura 6.14. Os vértices que colidem na representação baricêntrica da rede foram segregados no interior de círculos negros e formam quatro classes: $\{A, C, E\}$, $\{B, D, F\}$, $\{G, I, K\}$, e $\{H, J, L\}$	87
6.19	Pode-se observar que os grafos derivados de $K_2^{(3)}$ com voltagens 12, e e 13 e $K_2^{(3)}$ com voltagens 12, e e 123 são isomorfos.	88
6.20	Todo automorfismo em \mathcal{B} está unicamente associado com um automorfismo em \mathcal{H} e uma translação da representação baricêntrica. Isto sugere inserir \mathcal{B} no produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ usando a correspondência da Seção 6.2.1 quando se parte do buquê B_2 com voltagens (12, 01) e (123, 10) como grafo base, como pode ser visto em (a). Em (b) e (c), respectivamente, a permutação de \mathcal{H} no grafo quociente que indica a primeira coordenada de cada vértice, e a representação baricêntrica que fornece a segunda coordenada de cada vértice.	89
6.21	O grafo $K_2^{(4)}$ com voltagens em $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^3$ e uma representação pseudo-baricêntrica (tipo diamante) da rede derivada.	92
6.22	O grafo de voltagem da rede NC obtido pela atribuição de voltagens (12,(10)) e (1234,(01)) em $\mathcal{S}_4 \times \mathbb{Z}^2$ nos laços do buquê \mathcal{B}_2 . Os vértices são rotulados por permutações em \mathcal{S}_4 . Para maior clareza, as arestas são coloridas de acordo com suas voltagens em \mathbb{Z}^2 . Note que a célula unitária da representação baricêntrica está centrada em relação à célula primitiva da rede.	93
7.1	Um exemplo de uma representação baricêntrica limitada não trivial da árvore infinita regular de grau 3. A árvore foi construída começando na origem com uma 3-estrela simétrica, gerando 3 ramos. Em cada passo da construção, dois novos vértices são adicionados em cada ramo de modo a completar a vizinhança dos vértices de grau 1 (as folhas). Para tal, triângulos isósceles similares com parâmetro θ são desenhados de modo que cada folha está no baricentro e seus vizinhos estão nos vértices de um destes triângulos. Se $2a$ representa o tamanho da aresta terminal, então a base $2b$ do triângulo é dada por $b = a\theta$. Note que se $\theta = \sqrt{3}$ então i) a e b são constantes em cada passo e ii) a representação da rede hcb é obtida.	97
7.2	Uma representação baricêntrica da rede quadrada no espaço Euclidiano. O vetor representação pode ser definido com a sequência $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, \dots)$, obedecendo um padrão espiral.	98

7.3	Uma sequência finita de pontos começando em $\pi(X_1)$, perto de um ponto de acumulação, até $P = \pi(X_n)$	99
7.4	Um exemplo de partição do conjunto de vértices em blocos (infinitos) de imprimitividade para o grupo de automorfismos limitados. Para sql , \mathcal{B} é composto apenas por translações, e é fácil ver que elas preservam a partição: cada cor representa um bloco, e para um bloco Δ tem-se sempre $\Delta \cap t(\Delta) = \emptyset$ ou $\Delta \cap t(\Delta) = \Delta$	100
7.5	Um exemplo de um grafo 1-periódico que possui um sistema de imprimitividade com dois vértices por bloco $\{B_i, C_i\}$ e blocos com um só vértice $\{A_i\}$	101
7.6	Uma representação para um grafo N_σ gerado a partir do grafo 1-periódico da Figura 7.5. O grafo em preto representa o original. Os blocos são acrescentados como vértices em verde e vermelho. São também criadas arestas em verde e vermelho ligando os vértices criados a partir dos blocos aos vértices que compõem tais blocos no grafo original.	103
7.7	Em (a), uma grade 1-periódica com uma partição equitável do conjunto de vértices. Em (b), outra grade 1-periódica com seu grafo quociente e uma partição equivoltagem. Os multiconjuntos iguais a $\{0, 0, -1\}$, com arestas partindo de B e C , em destaque amarelo.	104
7.8	Um grafo 1-periódico com um sistema de blocos finitos de imprimitividade e dois grafos de voltagem: (a) sem partição equivoltagem e (b) com uma partição equivoltagem.	105
7.9	Definição esquemática do quociente Q por uma partição equivoltagem do grafo quociente N/\mathcal{T} de uma rede periódica (N, \mathcal{T})	105
7.10	No topo, a escada dupla com com dois blocos finitos de imprimitividade não equivalentes mostrados em verde e vermelho e seu grafo quociente. No fim, a sua representação baricêntrica (o caminho infinito).	106
7.11	Os grafos de voltagem (de cima para baixo) de uld-z e uld com a partição equivoltagem $\theta = \{\{U_1, U_2\}, \{U_3, U_4\}, \dots, \{U_{23}, U_{24}\}\}$. O quociente por θ exposto como o subgrafo vermelho de uld-z é isomorfo ao grafo de voltagem da rede cristalográfica srs-a	107
7.12	Uma rede periódica com um sistema de imprimitividade com blocos finitos, seu grafo de voltagem e o quociente por uma partição equivoltagem.	109
7.13	Uma representação periódica, baricêntrica do duplo hcb ; A aresta vertical (menor) tem peso 2.	109

7.14	Uma rede NC com um sistema de imprimitividade, mas com um grupo de automorfismos limitados que atua livremente, seu grafo de voltagem e diferentes quocientes. θ indica o quociente pela partição equivoltagem, ϕ_i o quociente por um grupo de automorfismos.	110
7.15	Um grafo de voltagem baseado no grafo de Frucht (o grafo de Frucht está em preto); a cor da aresta simboliza a respectiva voltagem.	112
7.16	Uma rede NC transitiva com um sistema de imprimitividade e seu grafo de voltagem.	113
7.17	Representação pseudo hexagonal do triplo hcb , uma rede NC com um sistema de imprimitividade admitindo um grupo de automorfismos limitados que atua livremente, seu grafo de voltagem e o quociente por uma partição equivoltagem.	115
7.18	Destacada em verde na parte (a) a aresta com voltagem 10 no quociente pela partição Q , bem como as arestas com voltagem 10 em N/\mathcal{T} , e também todas as arestas derivadas $A_t B_{t+10}$, $C_t D_{t+10}$ e $E_t F_{t+10}$ na rede periódica. Em (b), pode-se observar a consistência das correlações através do anel forte levantado a partir do 6-ciclo em Q percorrendo as arestas com voltagens 10, 01, 00, $\bar{1}0$, $0\bar{1}$ e 00.	117
7.19	Grafos 1-periódicos com sistema de imprimitividade apresentando ausência de correlações em (a), (b) e (d), mas correlação completa em (c): a permutação dos vértices A_0 e B_0 implica a permutação de todos os infinitos A_i e B_i , $i \in \mathbb{N}$	118
7.20	Observe que à esquerda está em destaque a ausência de correlação entre os blocos; à direita, correlação forte entre os blocos, que se propaga infinitamente na direção horizontal.	119
7.21	À esquerda superior, o grafo de voltagem de 4/4/o19 (veja o texto). À direita superior, o grafo de voltagem obtido depois de mudanças de origem em vértice-retículos evidenciando uma partição equivoltagem. Embaixo, o respectivo quociente.	120
7.22	Representação da rede 4/4/o19 como uma dupla ths . Note que uma célula primitiva está descrita. Vértices são agrupados em blocos usando as mesmas cores que foram usadas no grafo quociente; arestas levantadas das arestas simples em Q e formando um subgrafo isomorfo a $K_{2,2}$ são mostrados em azul, evidenciando a falta de correlações entre subgrafos cinza 1-periódicos.	122

7.23	Em (a), o grafo de voltagem de $4/4/o18$ já apresenta uma partição equivoltagem com quociente isomorfo ao quociente de ths . Em (b), a rede periódica correspondente a $4/4/o18$; observe a correlação completa. Em (c), o grafo de voltagem de $5/3/o6$ tem que ser feito com mudança de origens para evidenciar um grafo com partição equivoltagem.	123
8.1	Uma representação da rede nbo (grafo quociente $K_3^{(2)}$) com fibras ao longo da direção 100; as fibras coloridas (vermelhas e verdes) da rede 3-periódica formam o conjunto de vértices de uma rede regular 2-periódica de grau 8, apresentada como uma projeção (grafo quociente: B_4).	127
8.2	Uma representação da rede pts com fibras ao longo da direção 100; as fibras coloridas (vermelhas e verdes) da rede 3-periódica formam o conjunto de vértices de uma rede regular 2-periódica de grau 8.	128
8.3	Passos de redução do (esquerda) grafo de voltagem da rede pts ($C_4^{(2)}$) com o grafo de voltagem da fibra ao longo de 100 marcado em amarelo ao (direita) grafo de voltagem do grafo fibra (B_4).	128
8.4	Uma fibra geodésica da rede pts ao longo de 100 e seu grafo de voltagem.	128
8.5	Uma representação da rede correspondente ao empacotamento esférico $4/4/o19$ com fibras geodésicas ao longo da direção 001 - desenhadas ao longo da vertical da página; as fibras coloridas (verde e vermelha) da rede 3-periódica formam um conjunto de vértices de uma rede 2-periódica regular de grau 9 mostrada como projeção.	130
8.6	Passos de redução do (esquerda) grafo de voltagem da rede correspondente ao empacotamento esférico $4/4/o19$ indicando em amarelo os grafos de voltagem das duas fibras geodésicas que colidem ao longo da direção 001 até o (direita) grafo de voltagem do respectivo grafo fibra.	130
8.7	Imagens $\phi^{-s}(V)$ e $\phi^r(V)$ na mesma supercélula.	132
8.8	Produto de (linha preta) uma permutação cíclica ou (linha vermelha) duas permutações cíclicas por uma transposição (linha verde); todos os ciclos possuem orientação no sentido anti-horário. Linhas tracejadas indicam que o ciclo correspondente pode ser finito ou infinito.	132

8.9	Algumas combinações de permutações: em (a), uma transposição com ambos os vértices no suporte de um 16-ciclo causa uma excisão de um 8-ciclo. Em (b), uma transposição com um vértice em cada 16-ciclo, causando sua inserção e correspondente união dos ciclos. Em (c), uma transposição com os vértices no suporte de um ciclo infinito provocando uma excisão de um 4-ciclo. Em (d), uma transposição com um vértice num ciclo finito e outro num infinito, causando sua inserção e novamente uma união dos ciclos. Em (e), uma transposição com um vértice em cada ciclo infinito, causando a troca das partes semi-infinitas. Observe que, em (c), (d) e (e), o número de ciclos infinitos permanece inalterado.	133
8.10	Uma representação de uma rede NC construída a partir de nbo (a) e a sequência de grafos de voltagem mostrando partições equivoltagem começando do grafo de voltagem da rede NC (b) ao grafo de voltagem da nbo (d).	140
A.1	Os dois primeiros passos ($m = 0$ e $m = 1$) mostrando as duas primeiras excisões de $p_m = \prod_{i \leq m} (i, -i)t$	149

Parte I

Revisão Bibliográfica

Capítulo 1

Introdução

Grafos infinitos podem ter uma estrutura muito complexa. As linhas de pesquisa que se propõem a estudar tais grafos normalmente buscam alguma propriedade adicional para reduzir a gama de possibilidades que uma quantidade infinita de informações pode implicar. Os grafos infinitos que serão objeto deste estudo são simples (sem laços ou arestas múltiplas), 3-conexos, localmente finitos (cada vértice possui grau finito) e periódicos. Essencialmente, é o que será definido mais adiante como **redes periódicas**. A periodicidade reduz muito a complexidade do grafo infinito, pois ao invés de haver uma quantidade infinita de informações, há uma quantidade finita que se repete periodicamente [3].

A razão que leva ao estudo de tais grafos infinitos é a modelagem de estruturas cristalinas, objeto de pesquisa da Cristalografia. Os vértices e as arestas de um grafo representam os átomos e as interações químicas entre os mesmos, respectivamente (veja a Figura 1.1). No cristal, tais átomos estão dispostos numa configuração que se repete periodicamente em certas direções. Isto produz uma simetria translacional nestas direções, o que pode ser estudado através de automorfismos destes grafos. Por estes dois motivos, conceitos de Teoria de Grupos e de Teoria de Grafos serão o ponto de partida deste estudo nos dois primeiros capítulos. Os conceitos destas duas áreas se misturam e convergem para os conceitos de redes periódicas, vistos no terceiro capítulo.

O grafo em si é uma entidade abstrata. A princípio as arestas não possuem comprimento, e não há como se medirem os ângulos entre as mesmas. No entanto, se os vértices e as arestas forem substituídos respectivamente por pontos e segmentos de reta mergulhados no espaço Euclidiano \mathbb{R}^n , as simetrias do mergulho do grafo podem ser utilizadas como ferramentas adicionais. Mais adiante, o mergulho de um grafo no espaço Euclidiano será definido como uma **representação** do grafo. Observe a Figura 1.2. Na primeira imagem há uma representação de um grafo infinito. Na segunda, uma representação um pouco mais simétrica. Na terceira, a representação de máxima simetria para este grafo. Repare que, topologicamente,

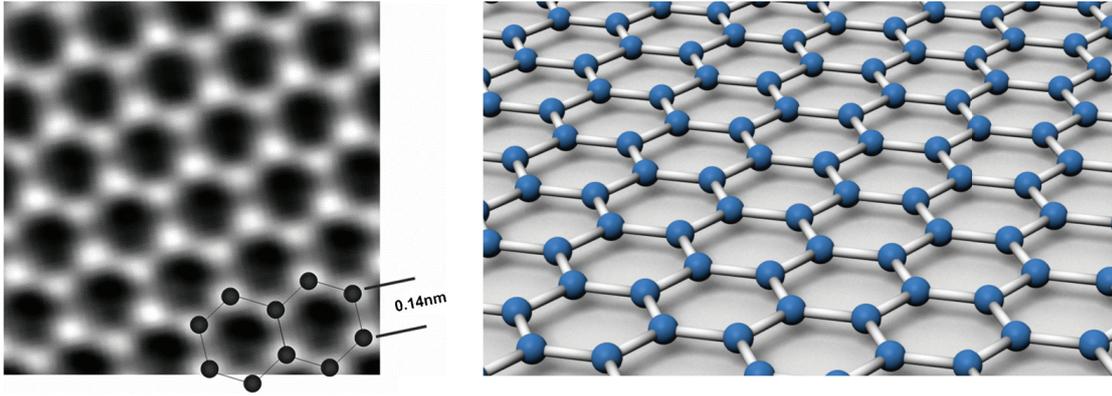


Figura 1.1: À esquerda uma imagem real da estrutura cristalina do grafeno, e à direita um grafo infinito que a representa [1].

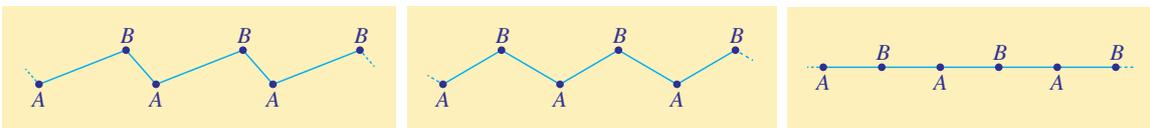


Figura 1.2: A figura da esquerda apresenta menos simetrias do que a intermediária, que por sua vez apresenta menos simetrias que a da direita, embora todas as três representem o mesmo grafo abstrato.

todas as três representam o mesmo grafo abstrato.

Uma vez que o objeto que está sendo estudado é um mergulho de um grafo num espaço Euclidiano, e como há inúmeras possibilidades para representações de um grafo, pode-se trabalhar agora na obtenção de uma representação que seja única e simplificada. Na verdade, será procurada uma representação definida como **representação baricêntrica**, onde cada vértice está no baricentro (centro de gravidade) dos seus primeiros vértices vizinhos. Ela é de fato uma configuração de máxima simetria, o que pode ser verificado em [4], e é única, como demonstrado em [5]. Um dos problemas enfrentados quando se busca a representação baricêntrica é a **colisão de vértices**, ou seja, quando a única maneira de obter esta representação implica a sobreposição de dois ou mais vértices. Este trabalho está voltado para uma classe de redes periódicas que apresenta sistematicamente colisões de vértices.

A periodicidade é uma característica tão forte, que a essência da natureza de uma rede periódica (infinita) pode ser resumida num grafo finito, que reúne informações básicas sobre os graus, e com rótulos sobre as arestas, que indicam as direções de periodicidade. Este grafo finito, que será definido rigorosamente no momento propício, chama-se **grafo de voltagem**. Encontrar propriedades importantes da rede periódica (infinita) a partir da simples análise do seu grafo quociente (finito) de voltagem correspondente é também um objetivo deste trabalho.

A cada rede periódica está associado um grupo de automorfismos. No caso de

uma **rede cristalográfica**, o grupo de automorfismos é isomorfo a um grupo chamado de **grupo de espaço**. Há 17 tipos bidimensionais, e 230 tipos tridimensionais [6]. Quando a rede possui um grupo de automorfismos que não é um grupo de espaço, a rede periódica é qualificada como uma **rede não cristalográfica (rede NC)**. **O objetivo deste trabalho é estudar detalhadamente a estrutura das redes NC, culminando com a demonstração de que a representação baricêntrica de qualquer rede NC apresenta colisão de vértices.**

Os **automorfismos** serão as principais ferramentas utilizadas no estudo de redes. Redes periódicas são caracterizadas principalmente por seus automorfismos translacionais, ou simplesmente *translações*, uma vez que a periodicidade permite a translação da rede inteira sobre ela mesma. As translações constituirão parte de uma importante classe de automorfismos a serem estudados, os **automorfismos limitados**, que serão definidos futuramente. Os únicos automorfismos limitados que as redes cristalográficas possuem são as translações. As redes NC se distinguem das cristalográficas exatamente por possuírem automorfismos limitados diferentes de translações, e tais automorfismos serão a chave para a descrição completa da estrutura de tais redes. **Descrever o grupo de automorfismos limitados das redes NC é parte do objetivo deste trabalho.**

A primeira parte deste trabalho (Capítulo 6) foi publicada em 2011, na revista de cristalografia teórica Acta Crystallographica A67, 240-251, sob o título de **Non-crystallographic nets with freely acting, non-abelian local automorphism groups** [7]. Como o próprio título sugere, a parte inicial trata de redes NC cujo grupo de automorfismos limitados é não abeliano e não admite pontos fixos. A razão de esta classe de redes NC ter sido escolhida para a primeira análise está relacionada com a natureza particular de sua estrutura: o grupo de automorfismos limitados neste caso é finitamente gerado. Com isso, além de uma demonstração de que representações baricêntricas de tais redes apresentam colisões de vértices, um procedimento para geração de redes NC não triviais é introduzido. A construção de uma rede NC através deste procedimento permite a compreensão e descrição do grupo de automorfismos limitados de tais redes como produto subdireto de grupos.

Embora este tenha sido um importante resultado, grupos de automorfismos que apresentam pontos fixos são extremamente mais complexos. A estratégia para a descrição da estrutura de redes que apresentam tais automorfismos foi restringir num primeiro momento o estudo a uma classe de redes particular: redes NC que admitem um sistema de imprimitividade com blocos finitos para o grupo de automorfismos limitados. Esta parte do trabalho (Capítulo 7) foi publicada em 2013, na mesma revista, em A69, 276-288, sob o título de **Non-crystallographic nets with finite blocks of imprimitivity for bounded automorphisms** [8]. Nesta parte demonstra-se, entre outros importantes resultados, que uma representação

baricêntrica de uma rede NC que apresenta blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados sempre apresenta colisões.

A conclusão do trabalho sobre redes NC (Capítulo 8) foi alcançada em três etapas: primeiramente, demonstra-se que redes NC 1-periódicas sempre admitem sistema de blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados; em seguida, este resultado é estendido a redes NC n-periódicas, utilizando-se o conceito dos grafos fibra como principal ferramenta; finalmente, uma vez que foi demonstrado que qualquer rede NC admite sistema de blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados, a aplicação do Teorema 7.4.2 do capítulo anterior garante que **representações baricêntricas de qualquer rede NC apresentam colisões de vértices**, finalizando o estudo das colisões.

Uma questão que pode surgir é o porquê do estudo de redes NC. Numa primeira análise, é claro que seria muito importante para o cristalógrafo obter a capacidade de distinguir entre redes cristalográficas e não cristalográficas a partir da análise direta dos seus grafos de voltagem, ou de alguma outra propriedade simples.

Além disso, há uma interessante possível aplicação à tecnologia de armazenamento de informação. Cristais cuja topologia é representada por uma rede NC podem exibir propriedades nunca antes vistas no que se refere à flexibilidade de sua estrutura. Isto porque uma rede NC apresenta automorfismos limitados que não necessariamente são translações, e possuem ordem finita. Isto implica maior flexibilidade. Observe um exemplo: aproveitando o grafo periódico na Figura 1.3(a), pode ser imaginada a aplicação de armazenamento de informação a qualquer composto que possua esta topologia, onde cada célula fornece 1 bit. Repare que, graças à reflexão local, há uma configuração possível para a informação "zero" e outra (a imagem da reflexão local) para a informação "um". Em (b), uma configuração bidimensional com semelhante propriedade. Numa rede cristalográfica (que constituem todas as estruturas cristalinas de que se tem conhecimento hoje) não há esta possibilidade de configuração: todos os automorfismos limitados são translações.

Recentemente (janeiro de 2012, [9]), a IBM anunciou que depois de cinco anos de trabalho, conseguiram reduzir de um milhão para apenas doze o número de átomos necessários para criar um bit de informação. Isto possibilitaria aumentar, segundo a IBM, a capacidade dos HDs atuais de 1 terabyte para pelo menos 150 terabytes. Imaginando que uma miniaturização ainda maior (dois átomos para 1 bit) aumentaria ainda mais a capacidade dos HDs, as redes NC podem ser muito úteis no futuro. Em outras palavras, a procura e a síntese de tais materiais podem se tornar por si mesmas um desafiante objetivo ao químico.

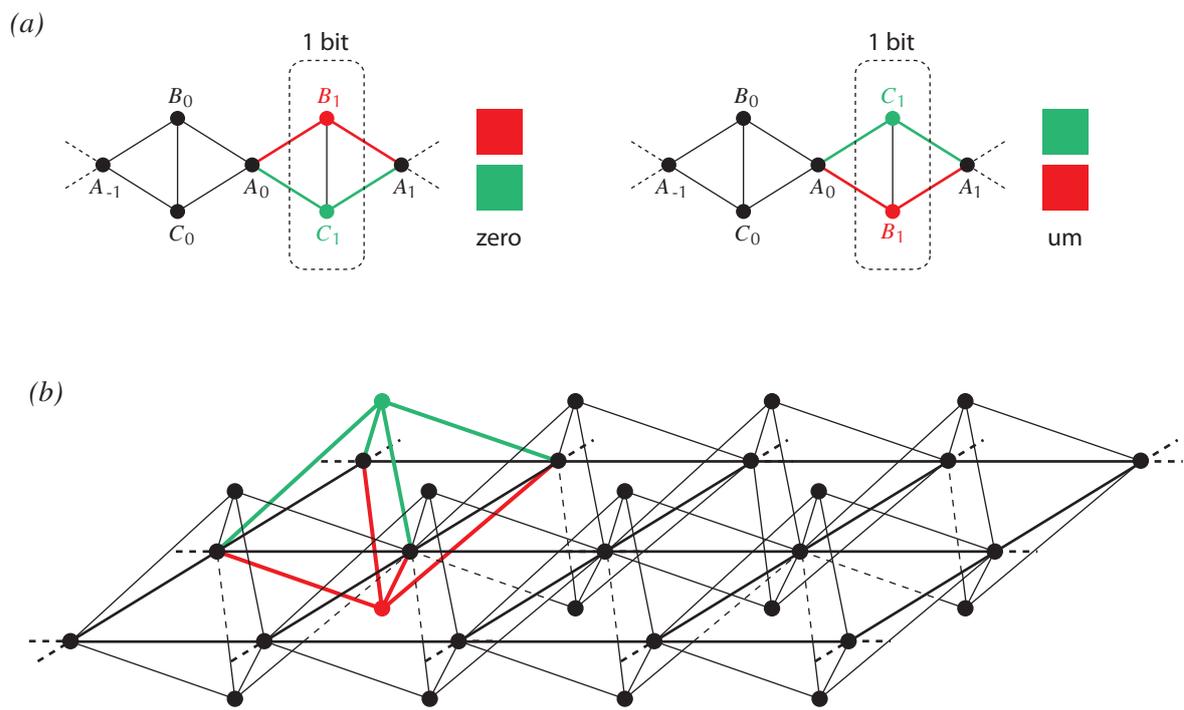


Figura 1.3: Em (a), cada célula representando 1 bit: uma reflexão local (A_1, B_1) cria as configurações para as informações zero e um. Em (b), uma configuração bidimensional semelhante.

Capítulo 2

Conceitos de Teoria de Grupos

2.1 Primeiros Conceitos

O conjunto dos automorfismos de um grafo, que será visto no próximo capítulo, possui a estrutura algébrica de um grupo, de maneira que será útil uma revisão de alguns conceitos e propriedades. As definições estão de acordo com [10], [11] e [12].

Definição 2.1.1. *Um conjunto \mathcal{T} com uma operação binária $\bullet : \mathcal{T} \times \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}$ é um **grupo** (\mathcal{T}, \bullet) se satisfaz as seguintes condições:*

- (a) *Associatividade: $a \bullet (b \bullet c) = (a \bullet b) \bullet c$, para todo $a, b, c \in \mathcal{T}$.*
- (b) *Elemento neutro: existe $e \in \mathcal{T}$ tal que $e \bullet a = a \bullet e = a$, para todo $a \in \mathcal{T}$.*
- (c) *Elemento inverso: para todo $a \in \mathcal{T}$, existe $b \in \mathcal{T}$ tal que $a \bullet b = b \bullet a = e$.*

Definição 2.1.2. *Um grupo é dito **comutativo**(ou **abeliano**) se satisfaz além de (a), (b) e (c), a condição de comutatividade: $a \bullet b = b \bullet a$, para todo $a, b \in \mathcal{T}$.*

O conjunto \mathcal{T} é chamado conjunto subjacente ao grupo (\mathcal{T}, \bullet) . Muitas vezes será utilizado simplesmente \mathcal{T} , ao invés da notação completa (\mathcal{T}, \bullet) , para denotar o grupo com a sua operação. A operação de um grupo também pode ser chamada de produto, ou multiplicação (mesmo que a represente uma adição). Também por conveniência será utilizada frequentemente a notação mais simplificada ab ao invés de $a \bullet b$. O número de elementos do grupo é dito a *ordem* do grupo. Um grupo (\mathcal{T}, \bullet) é *finito* quando o conjunto \mathcal{T} possui cardinalidade (denotada por $|\mathcal{T}|$) finita. A *identidade* de um grupo é o seu elemento neutro, e será denotada sempre por e . Um subconjunto não vazio \mathcal{S} de \mathcal{T} (denotado por $\mathcal{S} < \mathcal{T}$) é dito um *subgrupo* de \mathcal{T} quando, com a operação \bullet de \mathcal{T} , o conjunto \mathcal{S} é um grupo. Um subgrupo de \mathcal{T} é dito *próprio* se ele não é igual a \mathcal{T} e é dito *não trivial* se ele não é igual a e . Um subgrupo próprio \mathcal{M} de \mathcal{T} é *maximal* se não há subgrupo contendo propriamente \mathcal{M} e propriamente contido em \mathcal{T} .

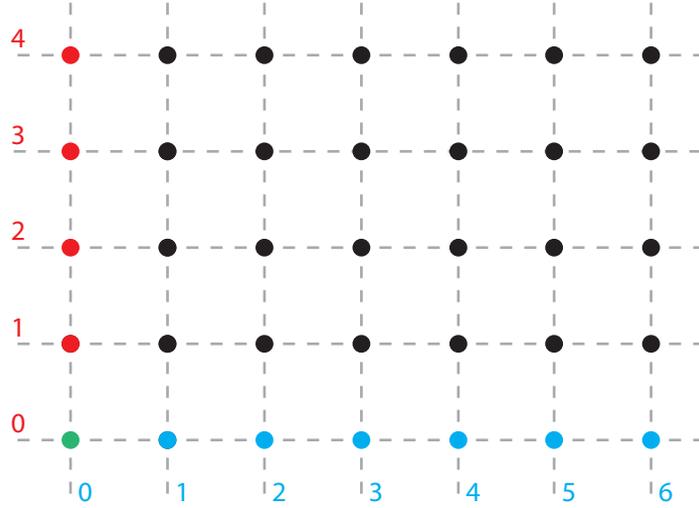


Figura 2.1: Uma representação gráfica do grupo $\mathcal{H}_2 = (\mathbb{Z}^2, +)$ e de dois subgrupos: em azul, $\Lambda_x = \{(x, 0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e em vermelho, $\Lambda_y = \{(0, y) : y \in \mathbb{Z}\}$. Em verde a interseção $\{e\} = \Lambda_x \cap \Lambda_y$.

Exemplo 2.1.1. O grupo $\mathcal{H}_n = (\mathbb{Z}^n, +)$ é também um grupo abeliano infinito. A operação é definida como a soma coordenada a coordenada: $(a_1, \dots, a_n) + (b_1, \dots, b_n) = (a_1 + b_1, \dots, a_n + b_n)$, para todo $(a_1, \dots, a_n), \dots, (b_1, \dots, b_n)$ em \mathbb{Z}^n . Uma representação gráfica para o caso $n = 2$ se encontra na Figura 2.1. Os conjuntos $\Lambda_x = \{(x, 0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e $\Lambda_y = \{(0, y) : y \in \mathbb{Z}\}$, com a operação soma definida analogamente, são dois subgrupos de \mathcal{H}_2 .

Uma correspondência biunívoca entre dois conjuntos é chamada uma *aplicação bijetiva* entre os mesmos. No caso de os dois conjuntos serem iguais a $X = \{A, B, C\}$, um exemplo de aplicação bijetiva $p : X \rightarrow X$ é definido por: $p(A) = B$, $p(B) = C$ e $p(C) = A$. Isto pode ser visto como uma desarrumação da ordem natural ABC de X , onde o elemento A vai para o lugar do B , o B toma o lugar do C e o C por sua vez vai para o lugar do A . Observe que esta ideia é naturalmente estendida a conjuntos enumeráveis quaisquer: se $X = \{\dots, A_{-2}, A_{-1}, A_0, A_1, A_2, \dots\}$, $i \in \mathbb{Z}$, então a aplicação bijetiva definida por $p(A_i) = A_{i+1}$ envia um elemento A_i para a posição seguinte A_{i+1} , para todo $i \in \mathbb{Z}$. Este conceito será estudado agora.

Definição 2.1.3. Uma *permutação* de um conjunto X é uma aplicação bijetiva $f : X \rightarrow X$.

Isto pode ser interpretado como uma desarrumação: cada elemento $x \in X$ toma o lugar de algum outro $x' = f(x) \in X$. O suporte de uma permutação p é o conjunto $\{x \in X : px \neq x\}$, isto é, é o conjunto de pontos não fixados pela permutação. O conjunto de todas as permutações sobre um conjunto X é um grupo (com a operação de composição de aplicações) chamado grupo *simétrico* sobre X , denotado

por $Sym(X)$. Se o conjunto X é finito (possui n elementos), então o grupo simétrico é denotado \mathcal{S}_n . Um grupo de permutações sobre X é um subgrupo de $Sym(X)$.

Exemplo 2.1.2. O grupo das permutações de três elementos \mathcal{S}_3 é um grupo finito que possui seis elementos: e , (12) , (13) , (23) , (123) e (132) .

Aqui cabe uma observação sobre a notação de permutações. Se há três elementos $\{A, B, C\}$ a serem permutados, a notação $(1, 2, 3)$, ou mais abreviadamente (123) , significa a permutação que desarruma a disposição ABC enviando A em B , B em C e C em A , ou seja, rearruma os elementos na posição CAB . A notação (12) significa que o terceiro elemento está fixado na terceira posição, ou seja, C está fixado e B troca de posição com A , transformando a disposição ABC em BAC .

A composição de permutações se dá da direita para a esquerda, ou seja, $(123)(12)$ significa primeiro desarrumar a disposição ABC via (12) , produzindo a disposição BAC ; em seguida desarrumar BAC via (123) , produzindo a disposição CBA . Como partiu-se da disposição ABC e foi obtida a disposição CBA , a composição foi equivalente à aplicação da permutação (13) , ou seja, $(123)(12) = (13)$.

Observe que o grupo \mathcal{S}_3 é não abeliano, pois $(12)(123) = (23)$ é diferente de $(123)(12) = (13)$.

Uma *transposição* num conjunto X é uma permutação que troca de posição dois elementos de X e mantém fixos todos os demais. Qualquer permutação de X pode ser escrita como um produto de transposições. Por exemplo, $(1234) = (12)(23)(34)$. Embora a decomposição de uma permutação p qualquer num produto de transposições não seja única, a paridade do número de transposições numa tal decomposição é única, e é chamada simplesmente de *paridade* de p . Assim, uma permutação p é dita *par* se numa decomposição de p em transposições há um número par de transposições. Analogamente, pode-se definir uma permutação *ímpar*. O conjunto das permutações pares de n elementos com a operação de composição de aplicações constitui um grupo, chamado *grupo alternado*, e denotado \mathcal{A}_n .

Dado um grupo \mathcal{T} , é possível utilizar um subgrupo $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ para organizar os elementos de \mathcal{T} em classes de acordo com alguma regra estabelecida por \mathcal{S} . Tais classes são chamadas *órbitas*, e os subgrupos que possuem as melhores propriedades para o particionamento de \mathcal{T} em órbitas são chamados subgrupos normais, cujas definições estão descritas a seguir.

Definição 2.1.4. Um subgrupo $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ é dito **normal** quando dado $s \in \mathcal{S}$, tem-se $t^{-1}st \in \mathcal{S}$, para todo $t \in \mathcal{T}$.

Qualquer subgrupo de um grupo abeliano é normal.

Definição 2.1.5. Se (\mathcal{T}, \bullet) é um grupo e X é um conjunto, então a **ação à esquerda** de \mathcal{T} sobre X é uma aplicação $\circ : \mathcal{T} \times X \rightarrow X$, definida por $(t, x) \mapsto tx$,

que satisfaz duas condições:

a) *Associatividade*: $(t \bullet w) \circ x = t \circ (w \circ x)$, para todo $t, w \in \mathcal{T}$ e $x \in X$.

b) *Identidade*: $e \circ x = x$, para todo $x \in X$.

O conjunto $\mathcal{T}x = \{tx : t \in \mathcal{T}\}$ é chamado de **órbita à esquerda** de um elemento $x \in X$.

Definição 2.1.6. Se (\mathcal{T}, \bullet) é um grupo e X é um conjunto, então a **ação à direita** de \mathcal{T} sobre X é uma aplicação $\circ : X \times \mathcal{T} \rightarrow X$, definida por $(x, t) \mapsto xt$, que satisfaz duas condições:

a) *Associatividade*: $x \circ (t \bullet w) = (x \circ t) \circ w$, para todo $t, w \in \mathcal{T}$ e $x \in X$.

b) *Identidade*: $x \circ e = x$, para todo $x \in X$.

O conjunto $x\mathcal{T} = \{xt : t \in \mathcal{T}\}$ é chamado de **órbita à direita** de um elemento $x \in X$.

Definição 2.1.7. Quando as órbitas à esquerda coincidem com as órbitas à direita, o conjunto $\mathcal{T}x$ é chamado simplesmente de **órbita** de x por \mathcal{T} . A órbita $\mathcal{T}x$ também pode ser denotada $[x]$, onde $x \in X$. A ação de $t \in \mathcal{T}$ sobre $x \in X$ será denotada por tx , ou eventualmente $t(x)$.

Definição 2.1.8. Um subconjunto de X contendo exatamente um elemento de cada órbita por um grupo \mathcal{T} é chamado **domínio fundamental** de X por \mathcal{T} .

Seja \mathcal{S} subgrupo de \mathcal{T} e X um conjunto onde \mathcal{S} atua.

Definição 2.1.9. A cardinalidade do conjunto das órbitas por \mathcal{S} é chamada **índice** de \mathcal{S} em \mathcal{T} . O índice de $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ pode ser denotado por $(\mathcal{S} : \mathcal{T})$.

Todas as órbitas por \mathcal{S} possuem a mesma cardinalidade, igual à cardinalidade de \mathcal{S} . O Teorema de Lagrange garante (para grupos finitos) que $|\mathcal{T}| = |\mathcal{S}|(\mathcal{T} : \mathcal{S})$.

Exemplo 2.1.3. Observe a Figura 2.2. Considere o grupo infinito $(\mathbb{Z}, +)$. O subgrupo normal $(2\mathbb{Z}, +)$ possui índice 2. Assim, $(\mathbb{Z}, +)$ sob a ação definida como **soma por um número par** possui duas órbitas: uma composta pelos números pares, que pode ser representada pelo elemento zero, definindo a órbita $[0] = \{0 + 2k, k \in \mathbb{Z}\}$, e outra pelos números ímpares, que pode ser representada pelo elemento 1, definindo a órbita $[1] = \{1 + 2k, k \in \mathbb{Z}\}$. Analogamente, outro subgrupo normal é $(3\mathbb{Z}, +)$, que possui índice 3, com a órbita $[0] = \{0 + 3k, k \in \mathbb{Z}\}$, a órbita $[1] = \{1 + 3k, k \in \mathbb{Z}\}$ e a órbita $[2] = \{2 + 3k, k \in \mathbb{Z}\}$.

Um subgrupo normal não só permite o particionamento de um grupo em classes com boas propriedades, mas também permite a definição de um novo grupo, onde cada classe é tratada como um elemento, como está descrito a seguir.

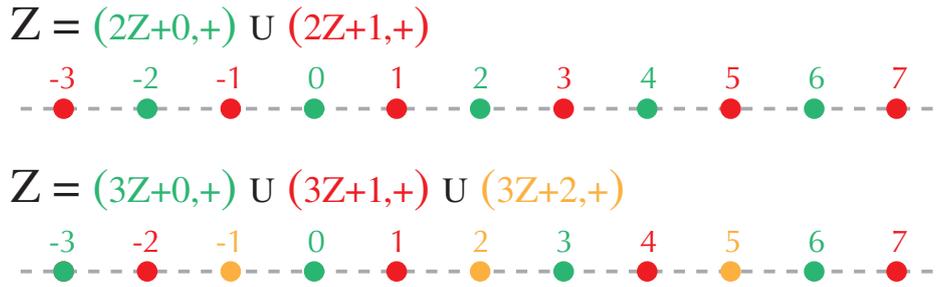


Figura 2.2: Em cada um dos dois exemplos, cada cor representa uma órbita.

Definição 2.1.10. Se \mathcal{T} é um grupo e \mathcal{S} é um subgrupo normal de \mathcal{T} , então o conjunto das órbitas pela ação de \mathcal{S} , com operação induzida de \mathcal{T} é um grupo chamado de **grupo quociente** de \mathcal{T} por \mathcal{S} , denotado por \mathcal{T}/\mathcal{S} .

Dado um elemento t de um grupo \mathcal{T} que atua sobre um conjunto X , diz-se que t fixa um elemento $x \in X$ se $tx = x$. O elemento x é dito um *ponto fixo* de X por t . Se o grupo \mathcal{T} possui somente elementos que não fixam pontos de X , diz-se que a ação de \mathcal{T} em X é livre, ou que \mathcal{T} atua livremente sobre X .

Agora serão vistos mais alguns subgrupos com propriedades úteis a este trabalho. A comutatividade, por exemplo, é uma boa propriedade, mas é até então restrita a grupos abelianos. No entanto, um subconjunto composto somente por elementos que possuem esta boa propriedade, que na verdade é um subgrupo, é o que se define a seguir.

Definição 2.1.11. O **centro** de um grupo \mathcal{T} é o subgrupo definido pelo conjunto $\{z \in \mathcal{T} | zt = tz, \forall t \in \mathcal{T}\}$. Em outras palavras, o centro de um grupo é o conjunto de elementos que comuta com todos os elementos do grupo.

Exemplo 2.1.4. Enquanto o centro de $(\mathbb{Z}^2, +)$ é ele mesmo (e obviamente isto ocorre para todo grupo abeliano), o centro de \mathcal{S}_3 é $\{e\}$.

A mesma ideia acima pode ser aplicada a um subgrupo, ou seja, pode-se definir o centro de um subgrupo.

Definição 2.1.12. O **centralizador** de um subgrupo $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ é o conjunto $\{w \in \mathcal{T} | ws = sw, \forall s \in \mathcal{S}\}$. Em outras palavras, o centralizador de $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ é o conjunto de elementos de \mathcal{T} que comuta com todos os elementos de \mathcal{S} . O centralizador também é um subgrupo de \mathcal{T} .

Outro subgrupo importante necessário a este trabalho é aquele gerado por um único elemento, definido como o conjunto formado pelo elemento e todas as suas potências positivas e negativas.

Definição 2.1.13. Se $t \in \mathcal{T}$, então $\langle t \rangle$ é o **subconjunto gerado** por t , dado por $\langle t \rangle = \{\dots, (t^{-1})^2, t^{-1}, e, t, t^2, \dots\}$. Pode-se mostrar que $\langle t \rangle$ é um subgrupo de \mathcal{T} . Diz-se que t é o **gerador** do grupo $\langle t \rangle$.

Definição 2.1.14. Um grupo gerado por um único elemento é chamado grupo *cíclico*.

Obviamente, para um grupo cíclico finito $\langle t \rangle$ existe $k \in \mathbb{N}$ tal que $t^k = e$. Este número k é chamado de *ordem do elemento* t . Analogamente à definição de conjunto gerado por um elemento, pode-se definir um conjunto gerado por um conjunto de elementos, como a seguir.

Definição 2.1.15. De uma forma geral, se $\{t_1, t_2, \dots, t_n\} \subset \mathcal{T}$, então $\langle t_1, t_2, \dots, t_n \rangle$ é o **subconjunto gerado** por $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$, dado por todos os produtos possíveis entre os elementos de $\{e, t_1, t_1^{-1}, t_2, t_2^{-1}, \dots, t_n, t_n^{-1}\}$. Pode-se mostrar que $\langle t_1, t_2, \dots, t_n \rangle$ é um subgrupo de \mathcal{T} . Diz-se que $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ é o **conjunto gerador** do grupo.

Se em \mathcal{T} existe $k \in \mathbb{N}$ tal que $t_i^k = e$, diz-se que a *ordem do elemento* t_i é k .

Exemplo 2.1.5. Observe que o subgrupo $\Lambda_x = \{(x, 0) : x \in \mathbb{Z}\}$ de $(\mathbb{Z}^2, +)$ é exatamente o subgrupo gerado por $(1, 0)$, ou seja, $\langle (1, 0) \rangle$. Analogamente, $\Lambda_y = \{(0, y) : y \in \mathbb{Z}\}$ é igual a $\langle (0, 1) \rangle$. Pode-se observar uma representação geométrica na Figura 2.1.

Alguns subgrupos possuem uma estrutura mais próxima de espaços vetoriais, e estes também serão de fundamental importância para o este trabalho. Podem ser observadas a seguir algumas propriedades nesta direção.

Definição 2.1.16. O **posto** de um grupo é a menor cardinalidade de um conjunto gerador do grupo.

Exemplo 2.1.6. O grupo $(\mathbb{Z}^2, +)$ pode ser gerado pelo conjunto $A = \{(1, 0), (0, 1), (1, 1), (1, 2)\}$, pode ser gerado pelo conjunto $B = \{(1, 0), (0, 1)\}$, ou ainda por $C = \{(1, 0), (0, 1), (1, 1)\}$. Como não há maneira de gerar tal grupo com menos de dois elementos, $B = \{(1, 0), (0, 1)\}$ é um conjunto gerador minimal de $(\mathbb{Z}^2, +)$, que conseqüentemente tem posto 2. Pode-se ainda dizer que $(\mathbb{Z}^2, +)$ é igual a $\langle (1, 0), (0, 1) \rangle$.

Definição 2.1.17. Um grupo **livre abeliano** é um grupo abeliano que possui um subconjunto finito B (base) tal que cada elemento pode ser escrito de forma única como combinação linear finita de elementos de B , com coeficientes inteiros.

Exemplo 2.1.7. O grupo $(\mathbb{Z}^2, +)$ é livre abeliano. Veja que uma base B para o grupo pode ser $t_1 = (1, 0)$ e $t_2 = (0, 1)$. Pode-se, por exemplo, escrever o elemento $(5, 7)$ de forma única como combinação linear de t_1 e t_2 da seguinte forma: $(5, 7) = 5t_1 + 7t_2$.

A organização e a classificação dos mais variados tipos de grupos depende de uma ferramenta que permita alguma forma de comparação entre os mesmos.

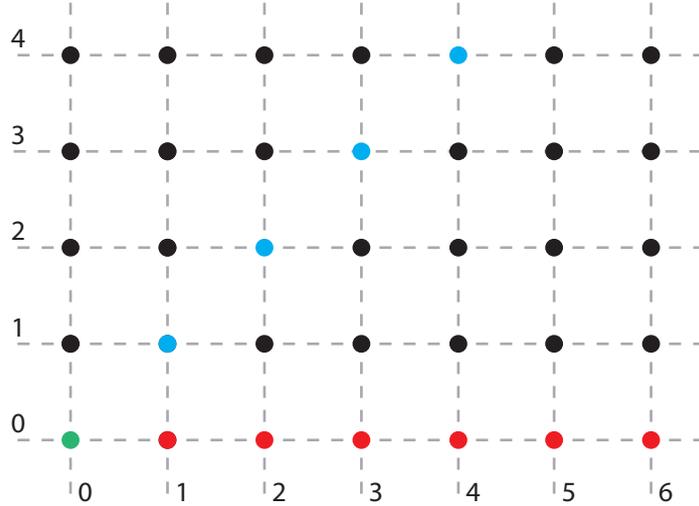


Figura 2.3: Dois subgrupos isomorfos de $(\mathbb{Z}^2, +)$: em vermelho, $\Lambda_{(x,0)} = \{(x,0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e em azul, $\Lambda_{(x,x)} = \{(x,x) : x \in \mathbb{Z}\}$. A origem, em verde, é identidade em ambos.

Definição 2.1.18. *Sejam (\mathcal{T}, \bullet) e (\mathcal{W}, \times) dois grupos. Uma aplicação $f : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{W}$ é um **homomorfismo** se satisfaz $f(t_1 \bullet t_2) = f(t_1) \times f(t_2)$, para todo $t_1, t_2 \in \mathcal{T}$.*

Definição 2.1.19. *Um homomorfismo injetivo é chamado de **monomorfismo**. Um homomorfismo sobrejetivo é chamado de **epimorfismo**. Um homomorfismo bijetivo é chamado de **isomorfismo**.*

Grupos isomorfos são indistinguíveis sob o ponto de vista da Teoria de Grupos, no sentido de que possuem a mesma estrutura e as mesmas propriedades. Diz-se que um grupo \mathcal{S} pode ser mergulhado (ou inserido) num grupo \mathcal{T} quando há um subgrupo de \mathcal{T} isomorfo a \mathcal{S} .

Definição 2.1.20. *Um isomorfismo de um grupo (\mathcal{T}, \bullet) em si mesmo é chamado de **automorfismo de grupo**.*

Exemplo 2.1.8. *Observe a Figura 2.3. Considere $\Lambda_{(x,0)} = \{(x,0) : x \in \mathbb{Z}\}$ e $\Lambda_{(x,x)} = \{(x,x) : x \in \mathbb{Z}\}$. A aplicação $\phi : \Lambda_{(x,0)} \rightarrow \Lambda_{(x,x)}$, definida por $\phi\{(x,0)\} = (x,x)$, é um homomorfismo de grupos. Veja que $\phi\{(x_1,0) + (x_2,0)\} = \phi\{(x_1 + x_2,0)\} = (x_1 + x_2, x_1 + x_2) = (x_1, x_1) + (x_2, x_2) = \phi(x_1,0) + \phi(x_2,0)$, para todo $x_1, x_2 \in \mathbb{Z}$. É claro que ϕ é bijetiva; então ϕ é um isomorfismo de grupos.*

Definição 2.1.21. *Sejam (\mathcal{T}, \bullet) e (\mathcal{W}, \times) dois grupos, e $\phi : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{W}$ um homomorfismo de grupos. O conjunto $\text{Ker } \phi = \{t \in \mathcal{T} : \phi(t) = e_{\mathcal{W}}\}$ é um subgrupo normal de \mathcal{T} chamado **núcleo** de ϕ . O conjunto $\text{Im } \phi = \{w \in \mathcal{W} : \phi(t) = w, t \in \mathcal{T}\}$ é um subgrupo de \mathcal{W} chamado **imagem** de ϕ .*

Definição 2.1.22. Uma **relação** entre geradores de um grupo é uma equação em que o produto de tais elementos (incluindo potências e inversos) é igual à identidade, à exceção do produto de um elemento por seu inverso (e não há nenhum subproduto igual à identidade).

Definição 2.1.23. Um grupo é dito **livre** se não há nenhuma relação entre seus geradores.

A seguir pode-se observar uma definição mais rigorosa dos produtos de elementos que geram relações. Seja \mathcal{S} um grupo livre de posto n , e $X_S = \{s_i : i \in I\}$ um conjunto de geradores deste grupo. Considere também o conjunto dos inversos dos geradores $X_S^{-1} = \{s_i^{-1} : i \in I\}$. Uma *palavra* em X_S é uma sequência de elementos de $X_S \cup X_S^{-1}$. Por exemplo, $s_1 s_4 s_3^{-1} s_2^{-1}$ é uma palavra em $X_S = \{s_1, s_2, s_3, s_4\}$. Diz-se que uma palavra é *reduzida* se não contém elementos adjacentes da forma s_i, s_i^{-1} . Por exemplo, em X_S , a palavra $s_2 s_1 s_1 s_2^{-1} s_4$ é reduzida, enquanto $s_2 s_3 s_3^{-1} s_1$ não é reduzida. Assim pode-se definir uma relação de equivalência em que duas palavras são equivalentes se uma pode ser obtida a partir da outra através de um número finito de inserções ou extrações de elementos da forma s_i^k, s_i^{-k} , $k \in \mathbb{Z}$. Por exemplo, as palavras $s_3 s_2^3 s_2^{-3} s_1$ e $s_3 s_1$ são equivalentes em X_S . No conjunto $F(X_S)$ das classes de palavras equivalentes em X_S pode-se definir uma multiplicação da forma $[p][q] = [pq]$ (veja em [11]), e $F(X_S)$ com esta operação é um grupo.

Qualquer grupo gerado por um conjunto de n elementos é a imagem por um epimorfismo de um grupo livre de posto n , como pode-se observar no próximo teorema [11]:

Teorema 2.1.1. *Seja um grupo H gerado por um conjunto $X_H = \{h_i, i \in I\}$, e considere $X_S = \{s_i, i \in I\}$ definido anteriormente. A aplicação $X_S \rightarrow X_H$ definida por $s_i \mapsto h_i$ se estende a um epimorfismo único $F(X_S) \rightarrow H$.*

Definição 2.1.24. *Os elementos do núcleo do epimorfismo $F(X) \rightarrow H$ são chamados **relatores**.*

Mais informalmente, um relator pode ser pensado como palavra $a_1 a_2 \dots a_k$ oriunda da relação $a_1 a_2 \dots a_k = e$.

Exemplo 2.1.9. *Observe que o subgrupo $\langle (123) \rangle$ de \mathcal{S}_3 não é livre, pois $(123)^3 = e$. Na realidade, nenhum grupo finito não trivial pode ser livre.*

Exemplo 2.1.10. *No caso particular do \mathcal{S}_3 , há a relação $(123)^3 = e$, ou seja, $(123)^3$ é um relator de \mathcal{S}_3 .*

Definição 2.1.25. *O comutador de dois elementos s e t de um grupo \mathcal{T} é o elemento $s^{-1} t^{-1} s t$, denotado por $[s, t]$. O conjunto de todos os comutadores de um grupo \mathcal{T} gera um subgrupo de \mathcal{T} chamado de **subgrupo comutador** de \mathcal{T} , denotado por $[\mathcal{T}, \mathcal{T}]$.*

2.2 Imprimitividade

Na seção anterior foi visto que, se \mathcal{T} é um grupo, uma maneira de colecionar elementos de X com mesmas propriedades é através da ação de \mathcal{T} sobre X , chamando tal classe de elementos de órbita de um elemento $x \in X$, definida como o conjunto $[x]_{\mathcal{T}} = \{tx : t \in \mathcal{T}\}$. Agora pode-se observar, dentro de uma órbita, como colecionar elementos com propriedades ainda mais particulares, criando subclasses dentro de classes. Para facilitar este estudo, conjuntos que possuem uma só órbita por \mathcal{T} serão o foco por um momento: são os chamados conjuntos \mathcal{T} -transitivos.

Definição 2.2.1. *Diz-se que \mathcal{T} atua **transitivamente** sobre X quando $[x]_{\mathcal{T}} = X$. Neste caso, diz-se que X é um conjunto **\mathcal{T} -transitivo**.*

Desta forma todos os elementos de X estão numa mesma órbita por \mathcal{T} . De forma equivalente, pode-se definir uma ação como transitiva se para quaisquer elementos $x, y \in X$ distintos existe sempre $t \in \mathcal{T}$ tal que $tx = y$.

Se X não é um conjunto \mathcal{T} -transitivo, merecem destaque os subgrupos de \mathcal{T} que estabilizam subconjuntos Y de X globalmente ou localmente, o que se define a seguir. Primeiramente define-se um subgrupo de \mathcal{T} que estabiliza globalmente um subconjunto Y de X .

Definição 2.2.2. *Seja X um conjunto \mathcal{T} -transitivo e $Y \subset X$. O **subgrupo estabilizador de Y em \mathcal{T}** é definido por $\mathcal{T}_{\{Y\}} = \{t \in \mathcal{T} : tY = Y\}$.*

Observe pela definição acima que não necessariamente os elementos de Y são fixados. Eles podem ser enviados em outros elementos, desde que sejam elementos ainda de Y . Um subgrupo de $\mathcal{T}_{\{Y\}}$ que fixa cada elemento de Y é definido a seguir.

Definição 2.2.3. *Seja X um conjunto \mathcal{T} -transitivo e $Y \subset X$. O **subgrupo estabilizador pontual de Y em \mathcal{T}** é definido por $\mathcal{T}_{(Y)} = \{t \in \mathcal{T} : ty = y, \forall y \in Y\}$.*

Exemplo 2.2.1. *O grupo de permutações de três elementos \mathcal{S}_3 é um grupo transitivo quando atua sobre si mesmo. Por exemplo, tome a órbita do elemento (12): cada elemento $e, (12), (13), (23), (123), (132)$ de \mathcal{S}_3 pode ser atingido compondo (12) respectivamente com (12), (e), (123), (132), (13), (23).*

Quando um conjunto X pode ser particionado em subconjuntos de modo que esta partição é preservada por \mathcal{T} , diz-se que X admite um sistema de imprimitividade para \mathcal{T} , uma das mais importantes definições para o restante deste trabalho.

Definição 2.2.4. *Se X é um conjunto sujeito à ação de \mathcal{T} , uma partição de X em subconjuntos, chamados **blocos de imprimitividade** (ou simplesmente blocos), é dita um **sistema de imprimitividade** para \mathcal{T} se \mathcal{T} preserva a partição, isto é, se qualquer $t \in \mathcal{T}$ leva um bloco Δ num bloco $t\Delta$.*

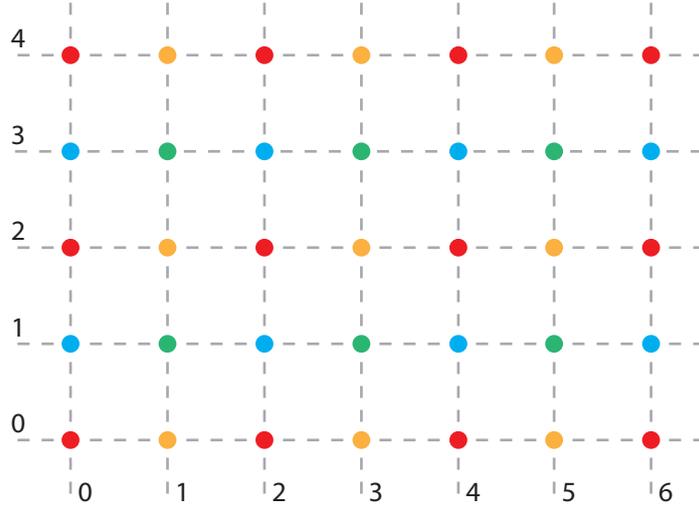


Figura 2.4: O conjunto \mathbb{Z}^2 admite uma partição σ em 4 blocos infinitos de imprimitividade, representados pelas 4 cores diferentes na Figura.

Se Δ é um bloco de imprimitividade para \mathcal{T} , então ou $\Delta \cap t(\Delta) = \emptyset$ ou $\Delta = t(\Delta)$, $t \in \mathcal{T}$. Se cada bloco é constituído por apenas um único elemento, ou se todo o conjunto X é um bloco, então diz-se que o sistema de imprimitividade é *trivial*. Se todos os sistemas de imprimitividade de X são triviais para \mathcal{T} , diz-se que a ação de \mathcal{T} é *primitiva*. Diz-se então que o grupo \mathcal{T} é *primitivo* sobre X . Caso contrário, ou seja, se X admite para \mathcal{T} partição com blocos não triviais de imprimitividade, a ação é dita *imprimitiva*.

Exemplo 2.2.2. *Considere a ação do grupo de translações \mathcal{T}_I inteiras sobre o conjunto $\mathbb{Z}^2 = \{(x, y) : x, y \in \mathbb{Z}\}$, dada por $t(x, y) = (x + t_n, y + t_m)$, para $t = (t_n, t_m) \in \mathbb{Z}^2$. Observe que \mathbb{Z}^2 admite partição σ com 4 blocos infinitos de imprimitividade, como se vê na Figura 2.4: em vermelho, o bloco dos pontos em que ambas as coordenadas x e y são pares. Em azul, com x par e y ímpar. Em amarelo, com x ímpar e y par. Finalmente, em verde, os blocos em que ambas as coordenadas são ímpares. Note que uma translação envia um bloco sobre um bloco diferente (se t_n e t_m são de paridades diferentes), ou fixa blocos (se t_n e t_m são de mesma paridade).*

2.3 Produtos

Muitos grupos que serão objeto deste estudo podem ser obtidos através da combinação de grupos mais elementares. Agora serão estudadas algumas formas de combinar grupos, que se chamam produtos. Todos os produtos necessários aqui podem ser vistos como externos, ou seja, criados a partir de grupos estudados individualmente e em seguida combinados formando uma estrutura maior. O primeiro e

mais simples é chamado produto direto, e servirá de base para os produtos seguintes.

Definição 2.3.1. O **produto direto** $\mathcal{T} \times \mathcal{F}$ de dois grupos \mathcal{T} e \mathcal{F} é definido sobre o produto cartesiano $\{(t, f) : t \in \mathcal{T}, s \in \mathcal{F}\}$ com multiplicação definida componente a componente por $(t_2, f_2)(t_1, f_1) = (t_2t_1, f_2f_1)$.

Pode ser definido analogamente sem dificuldades o produto direto de n grupos. Se os n grupos são iguais a \mathcal{T} , então pode-se denotar $\mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \dots \mathcal{T}$ por \mathcal{T}^n .

Definição 2.3.2. Seja \mathcal{T} um grupo. O subgrupo **diagonal** de um grupo \mathcal{T}^n é o subgrupo $\{(t, t, \dots, t) \in \mathcal{T}^n : t \in \mathcal{T}\}$.

Observe que foi muito simples definir produto direto, uma vez que as operações de \mathcal{T} e \mathcal{F} não se misturam realmente: a multiplicação é definida componente a componente. Em alguns momentos, no entanto, precisa-se de uma estrutura mais complexa. Considere na segunda componente, ao invés de f_2f_1 , a multiplicação $\phi_{(t_1)^{-1}}(f_2)f_1$, onde $\phi_{(t_1)^{-1}}(f_2)$ é um elemento de \mathcal{F} relacionado com $t_1 \in \mathcal{T}$ e $f_2 \in \mathcal{F}$. Esta aplicação ϕ será definida adequadamente conforme o caso. Alterando desta maneira a multiplicação no produto direto, obtém-se a definição de produto semidireto.

Definição 2.3.3. O **produto semidireto** $\mathcal{T} \ltimes \mathcal{F}$ de dois grupos \mathcal{T} e \mathcal{F} é definido sobre o produto cartesiano $\{(t, f) : t \in \mathcal{T}, s \in \mathcal{F}\}$ com multiplicação definida por $(t_2, f_2)(t_1, f_1) = (t_2t_1, \phi_{(t_1)^{-1}}(f_2)f_1)$, onde $\phi : \mathcal{T} \rightarrow \text{Aut}(\mathcal{F})$ é um homomorfismo de grupos.

Apoiado no conceito de produto semidireto pode-se definir o produto entrelaçado, conceito fortemente relacionado com grupos de permutação e sistemas de imprimitividade ([11] e [13]).

Definição 2.3.4. Sejam \mathcal{T} e \mathcal{F} dois grupos, e Z um conjunto onde \mathcal{T} atua. Considere \mathcal{K} o grupo das aplicações $f : Z \rightarrow \mathcal{F}$. O **produto entrelaçado** $\mathcal{T} \ltimes \mathcal{K}$ é o produto semidireto $\mathcal{T} \ltimes \mathcal{K}$.

\mathcal{K} é um grupo com multiplicação (ponto a ponto) definida por: $f_1f_2(z) = f_1(z)f_2(z)$, com $z \in Z$. Para entender melhor a necessidade da definição do produto entrelaçado, observe o seguinte exemplo:

Exemplo 2.3.1. Considere o conjunto N de pontos formado por duas sequências infinitas conforme a Figura 2.5a, correspondendo a $\mathbb{Z} \times \{1, 2\}$. A família de aplicações que será utilizada neste conjunto, como pode ser visto na parte (b) da mesma figura, será formada por dois tipos de aplicações: o primeiro tipo compreende as aplicações t_n que levam A_k em A_{n+k} e B_k em B_{n+k} , formando o grupo \mathcal{T} de translações de

N ; o segundo tipo compreende as transposições $f_r = (A_r, B_r)$, que permutam os elementos A_r e B_r . Por exemplo, $f_2 = (A_2, B_2)$ é uma aplicação que permuta A_2 com B_2 e fixa todos os demais pontos. Repare que $f_s^2 = id$ (identidade). Assim, cada f pode ser visto como uma aplicação $f : N \rightarrow N$. Uma aplicação de N então pode ser descrita da forma (t_n, f_r) , com ação primeiro de f_r e depois de t_n . Sejam duas aplicações (t_3, f_0) e (t_2, f_3) , como se vê na Figura 2.5c. Para acompanhar o que propõe a figura, o produto $(t_2, f_3)(t_3, f_0)$ tem que ser equivalente à translação $t_5 = (t_5, id)$ de 5 unidades. Se fosse utilizado o produto direto, este objetivo não seria atingido: $(t_2 t_3, f_0 f_3) = (t_5, f_0 f_3) \neq (t_5, id)$. Será então utilizada a seguinte definição: $(t_y, f_q)(t_x, f_p) = (t_y + t_x, f_{q-x} f_p)$. Agora o produto das aplicações representadas na figura é descrito como $(t_2 t_3, f_{3-3} f_0) = (t_5, f_0 f_0) = (t_5, id)$. Neste exemplo, seguindo a definição apresentada, tem-se $\phi_{(t_x)^{-1}}(f_q) = f_{q-x}$ (e obviamente, $\phi_{(t_x)^{-1}}(id) = id$). Aplicando a definição a mais alguns exemplos: na Figura 2.5(d), o produto é $(t_3, f_2)(t_2, f_0^2) = (t_5, f_{2-2} id) = (t_5, f_0 id) = (t_5, f_0)$. Na Figura 2.5(e), tem-se $(t_1, f_4^2)(t_4, f_0) = (t_1, id)(t_4, f_0) = (t_5, id f_0) = (t_5, f_0)$. Na Figura 2.5(f), tem-se finalmente $(t_1, f_4^2)(t_4, f_0^2) = (t_1, id)(t_4, id) = (t_5, id id) = (t_5, id)$. Analogamente pode ser considerada a interação de translações com produtos quaisquer de transposições, uma vez que as transposições não interagem entre si. Por exemplo, $(t_y, f_q f_h)(t_x, f_p f_g) = (t_y + t_x, f_{q-x} f_{h-x} f_p f_g)$. A família de aplicações considerada atuando em N tem estrutura de grupo, mais especificamente, o produto semidireto de \mathcal{T} por $\mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}}$. De uma forma mais concisa, tem a estrutura do produto entrelaçado de \mathcal{T} por \mathcal{S}_2 .

A relação do produto entrelaçado com sistemas de imprimitividade será vista com mais detalhes nos próximos capítulos. Além do produto entrelaçado, também será necessário um importante tipo de subgrupo do produto direto de dois grupos, chamado produto subdireto. Seja $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_2 \times \dots \times \mathcal{S}_n$. Um elemento s de \mathcal{S} pode ser então descrito como $s = (s_1, s_2, \dots, s_n)$. Define-se a projeção $\pi_i : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}_i$ de \mathcal{S} sobre seu i -ésimo fator \mathcal{S}_i por $\pi_i s = s_i$.

Definição 2.3.5. Um subgrupo \mathcal{H} de \mathcal{S} é chamado **produto subdireto** de uma família de grupos $\{\mathcal{S}_i\}_{i \in I}$ se para todo $j \in I$ e para todo $s_j \in \mathcal{S}_j$ existe um elemento $s \in \mathcal{H}$ tal que $\pi_j s = s_j$. Assim, \mathcal{H} é projetado sobrejetivamente sobre cada fator do produto direto $\mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_2 \times \dots \times \mathcal{S}_n$.

Exemplo 2.3.2. Seja \mathcal{T} um grupo. O subgrupo diagonal de \mathcal{T}^n é claramente um produto subdireto. De fato, dado um elemento $t_k \in \mathcal{T}$, é claro que existe $(t_k, \dots, t_k, \dots, t_k) \in \mathcal{T}^n$ tal que $\pi_k(t_k, \dots, t_k, \dots, t_k) = t_k$, e as projeções π_i , com $i \in \{1, \dots, n\}$ são sobrejetivas. No entanto, basta tomar um elemento $(a_1, \dots, a_i, \dots, a_j, \dots, a_n)$ com $a_i \neq a_j$ para que se observe que o subgrupo diagonal é um subgrupo próprio do produto direto. Outro exemplo que pode ser considerado

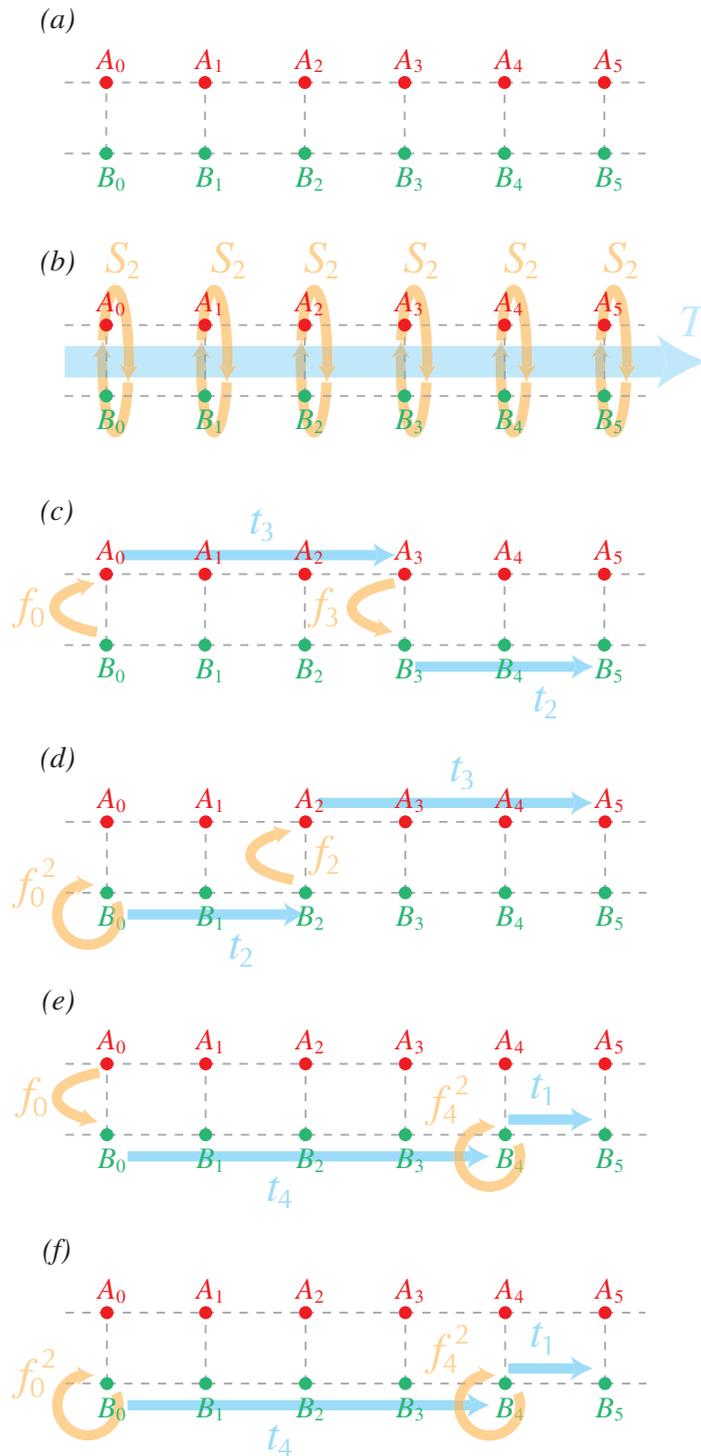


Figura 2.5: Observe a seqüência infinita de pontos em (a). Algumas aplicações possíveis estão em destaque em (b). Em (c), destacadas duas aplicações: (t_3, f_0) , que leva B_0 em A_3 e (t_2, f_3) , que leva A_3 em B_5 . Em (d), (e) e (f) mais exemplos de produto semidiretos.

é o subgrupo $\langle (12, (0, 1)), (123, (1, 0)) \rangle$, gerado pelos elementos $\alpha = (12, (0, 1))$ e $\beta = (123, (1, 0))$ do produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$. Repare que π_1 e π_2 são nitidamente sobrejetivas, uma vez que 12 e 123 geram \mathcal{S}_3 e $(0, 1)$ e $(1, 0)$ geram \mathbb{Z}^2 . Entretanto, o elemento $(12, (1, 1)) \in \mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$, por exemplo, não pode ser gerado por α e β , mostrando que $\langle (12, (0, 1)), (123, (1, 0)) \rangle$ é um subgrupo próprio de $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$.

Capítulo 3

Conceitos de Teoria de Grafos

3.1 Primeiros Conceitos

A maioria das seguintes definições está de acordo com [4], [14] e [15]. Como referência complementar, recomenda-se [16]. Um grafo $G = (\mathbf{V}, \mathbf{E}, i)$ é uma tripla formada por um conjunto de vértices \mathbf{V} , um conjunto de arestas \mathbf{E} e uma função de incidência definida por $i : e \mapsto i(e) = \{A, B\}$, para $e \in \mathbf{E}$, $(A, B) \in \mathbf{V}^2$. A relação de incidência pode ser denotada por $e \smile \{A, B\}$. Neste trabalho serão importantes grafos com orientação; para definir tais grafos, faz-se necessária a introdução do conceito de digrafo. Um *digrafo* $G = (\mathbf{V}, \mathbf{E}, i)$ é uma tripla formada por um conjunto de vértices \mathbf{V} , um conjunto de arestas \mathbf{E} e uma função de incidência definida por $i : e \mapsto i(e) = (A, B)$, para $e \in \mathbf{E}$, $(A, B) \in \mathbf{V}^2$. A relação de incidência pode ser denotada por $e \smile (A, B)$, ou mais simplesmente $e = AB$. Observe que, quando se define um digrafo, há uma ordem a ser respeitada na relação de incidência, o que não ocorre na definição de um grafo. Neste trabalho serão usadas letras maiúsculas para vértices, e minúsculas para as arestas. Para que se defina uma *orientação* σ sobre um grafo G , introduz-se o digrafo $G^\pm = (\mathbf{V}, \mathbf{E}^\pm, i^\pm)$, onde: (a) $\sigma : \mathbf{E}^\pm \rightarrow \mathbf{E}$ é uma aplicação sobrejetiva com dois elementos de \mathbf{E}^\pm associados a um elemento de \mathbf{E} , de modo que as arestas orientadas e^+ e e^- são associadas à aresta e . (b) $i^\pm(e^+) = (A, B)$ e $i^\pm(e^-) = (B, A)$ para $e \smile \{A, B\}$. A relação de incidência em G^\pm será denotada por $e^+ = AB$ e $e^- = BA$. Diz-se que e^+ começa na fonte A e termina no sumidouro B . As fontes e os sumidouros são ditos os extremos de uma aresta. Os vértices A e B de (A, B) são ditos *adjacentes* um ao outro, e *incidentes* à aresta AB . Vértices ou arestas que não são adjacentes são ditos *independentes*. Um elemento do conjunto união $\mathbf{V} \cup \mathbf{E}$ será chamado apenas de *elemento* de G .

O *grau* de um vértice V é o número de arestas incidentes a ele, denotado $deg(V)$. Um *laço* é uma aresta que admite apenas um extremo. Um laço deve ser contabilizado duas vezes para que seja obtido o grau do respectivo vértice. Se duas ou mais

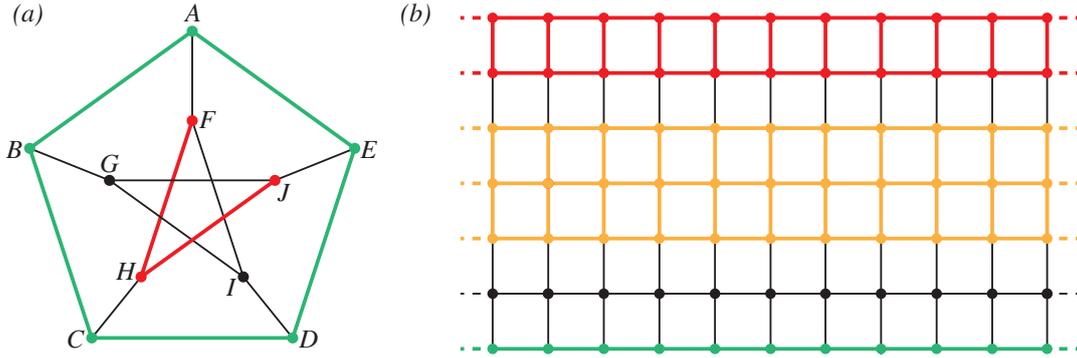


Figura 3.1: Um grafo finito em (a) e um grafo infinito em (b). Em destaque, alguns subgrafos.

arestas (que não são laços) possuem apenas dois vértices como extremos, elas são ditas arestas *múltiplas*. Um grafo *simplex* é um grafo sem laços ou arestas múltiplas. Um grafo é dito k -regular se cada vértice tem grau k . Um *subgrafo* $G' = (\mathbf{V}', \mathbf{E}', i')$ é um grafo onde $\mathbf{V}' \subset \mathbf{V}$, $\mathbf{E}' \subset \mathbf{E}$ e i' é uma restrição de i . O subgrafo *induzido* por um subconjunto $\mathbf{V}' \subset \mathbf{V}$ é o subgrafo de G contendo \mathbf{V}' e todas as arestas em \mathbf{E} com ambos os extremos em \mathbf{V}' . O subgrafo *induzido* por um subconjunto $\mathbf{E}' \subset \mathbf{E}$ é o subgrafo de G contendo \mathbf{E}' e todos os vértices extremos de arestas em \mathbf{E}' . Um grafo *finito* (resp. *infinito*) é aquele que possui um número finito (resp. infinito) de vértices e arestas. O grafo 2-regular infinito é chamado grafo *linear*.

Exemplo 3.1.1. Observe na Figura 3.1(a) um grafo finito chamado grafo de Petersen. Este grafo tem \mathbf{V} igual a $\{A, B, C, D, E, F, G, H, I, J\}$ e \mathbf{E} igual a $\{AB, BC, CD, DE, EA, FH, HJ, JG, GI, IF, FA, GB, HC, ID, JE\}$. Veja que a aresta AB tem fonte A e sumidouro B . Também, AB é incidente a A e a B . As arestas AE e AF também são incidentes a A . O vértice A é adjacente a B , a E e também a F . Os vértices A e C são independentes. Todos os vértices do grafo possuem grau 3, o que implica que o grafo é 3-regular. Veja em destaque o grafo 2-regular pentagonal verde. Pode-se dizer que este é um subgrafo induzido pelos vértices A, B, C, D e E . Também pode-se dizer que ele é um subgrafo induzido pelas arestas AB, BC, CD, DE e EA . O subgrafo induzido pelos vértices F, H e J só possui as arestas FH e HJ , e está destacado em vermelho. Veja que ele não é regular, pois os vértices F e J possuem grau 1, enquanto H possui grau 2. Na Figura 3.1(b) podem ser observados grafos infinitos na direção horizontal. O amarelo também não é regular, pois há vértices de graus 3 e 4. Observam-se destacados três subgrafos infinitos: em vermelho, um subgrafo chamado escada. Em amarelo, uma escada dupla. O subgrafo verde é um exemplo de grafo linear.

Definição 3.1.1. Um *buquê* B_n é um grafo composto por um único vértice e n laços.

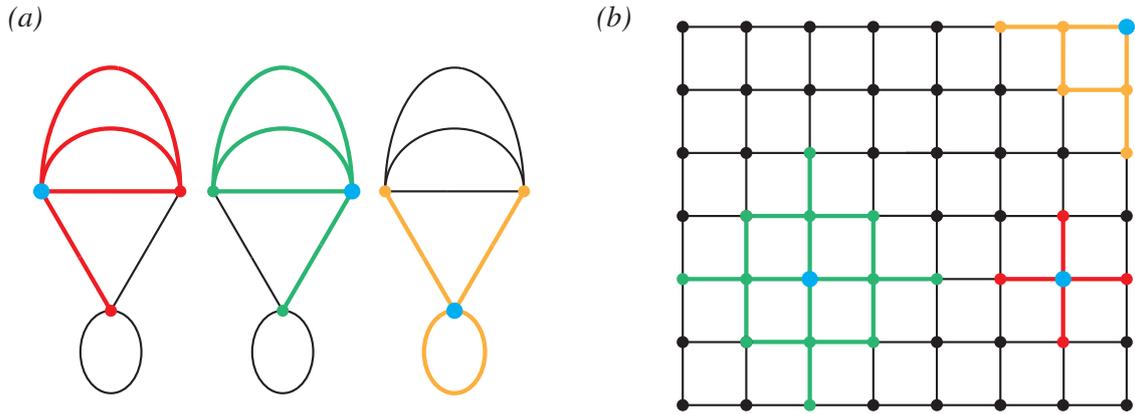


Figura 3.4: Estrelas e bolas centradas nos vértices azuis. Em (a), três estrelas. Em (b), duas bolas de raio 2 (verde e amarelo) e uma estrela (vermelho).

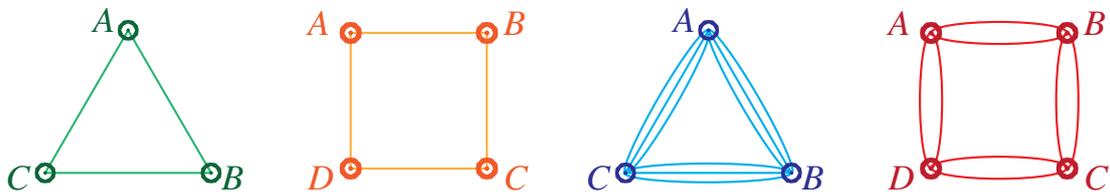


Figura 3.5: Respectivamente, os ciclos C_3 e C_4 , e os grafos $C_3^{(3)}$ e $C_4^{(2)}$.

que o comprimento do trecho de W entre U e V . Exemplos de passeio, caminho, geodésica e atalho podem ser vistos na Figura 3.3.

Exemplo 3.1.3. Observe a Figura 3.3. Em preto, um passeio entre A e B de comprimento 12. Em amarelo, pode-se ver um caminho entre A e B de comprimento 10. Este caminho não é geodésico, pois em azul pontilhado pode-se encontrar um atalho que possibilita um caminho mais curto entre tais vértices. Em verde, uma geodésica entre A e B . Como seu comprimento é 8, esta é a distância entre A e B .

Uma *bola* de centro no vértice U e raio $r \in \mathbb{N}$ é o subgrafo induzido por U e todos os vértices cuja distância até U é menor ou igual a r . Isto pode incluir arestas múltiplas e laços. Uma *estrela* centrada em U é uma bola de centro em U e raio 1. Se o grau de U é n , a estrela também pode ser chamada de n -estrela, denotada $S_n^{(k)}$ se possui k laços.

Exemplo 3.1.4. Na Figura 3.4, em (a) pode-se ver 3 bolas de raio 1, ou seja, três estrelas de um grafo, denotadas respectivamente por $S_4^{(0)}$ (vermelha), $S_4^{(0)}$ (verde) e $S_4^{(1)}$ (amarela). Em (b), exemplos de bolas de raio 2 em amarelo e verde, e uma estrela em vermelho $S_4^{(1)}$.

Definição 3.1.3. Será denotado por $C_k^{(n)}$ o grafo obtido do ciclo C_k substituindo-se cada aresta AB por n arestas múltiplas AB .

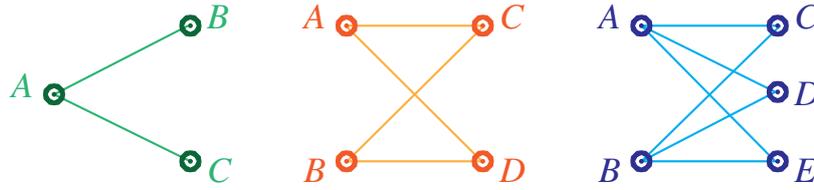


Figura 3.6: Respectivamente, os grafos $K_{1,2}$, $K_{2,2}$ e $K_{2,3}$.

Exemplo 3.1.5. Podem ser observados na Figura 3.5 os ciclos C_3 e C_4 , e os grafos $C_3^{(3)}$ e $C_4^{(2)}$. Na Figura 3.1, observa-se em (a) um ciclo C_5 em verde.

Definição 3.1.4. Será denotado por $K_{p,q}$ o grafo cujo conjunto de vértices pode ser dividido em dois subconjuntos disjuntos X_p com p vértices e X_q com q vértices, ambos compostos por vértices independentes, de maneira que cada vértice em X_p está ligado a todos os vértices de X_q .

Exemplo 3.1.6. Podem ser observados na Figura 3.6 os grafos $K_{1,2}$, $K_{2,2}$ e $K_{2,3}$, respectivamente.

3.2 Ciclos e Cociclos

Definem-se agora importantes ferramentas da Álgebra Linear para o estudo de grafos. Primeiramente, um espaço vetorial associado a um grafo finito G chamado espaço aresta. A seguir, definem-se dois subespaços vetoriais do espaço aresta, chamados espaço ciclo e espaço cociclo. São dois subespaços complementares, e mais adiante serão de grande ajuda para a obtenção de propriedades topológicas e geométricas de grafos finitos especiais que serão objeto deste estudo.

Definição 3.2.1. O **espaço aresta** de G é definido como o espaço vetorial em \mathbb{Z} admitindo as arestas orientadas de G como vetores base.

Definição 3.2.2. Um **vetor cociclo** (ou simplesmente cociclo) de um vértice U é a soma das arestas (diferentes de laços) incidentes a U , orientadas para fora de U . Ou seja, um cociclo é induzido por uma estrela sem laços centrada em U .

Definição 3.2.3. O **espaço cociclo** é o subespaço do espaço aresta gerado pelas combinações lineares de cociclos.

Definição 3.2.4. Um **vetor ciclo** (ou simplesmente ciclo, quando não houver risco de confusão) de G é uma combinação finita de arestas induzindo um ciclo.

Definição 3.2.5. O **espaço ciclo** é o subespaço do espaço aresta gerado pelas combinações lineares de ciclos.

Uma *árvore* é um grafo conexo sem ciclos. Vértices da árvore que eventualmente tenham grau 1 são chamados *folhas*. Uma *árvore geradora* H de um grafo finito G é um subgrafo de G que é uma árvore e tal que $\mathbf{V}(G)=\mathbf{V}(H)$. Uma aresta de $\mathbf{E}(G)$ que não está em $\mathbf{E}(H)$ é dita uma *corda*. Cada corda que é adicionada à árvore geradora H cria um novo ciclo. Todos os ciclos criados desta forma induzem vetores ciclo linearmente independentes, pois cada um possui uma aresta (corda) que não está contida nos demais. Como o número de arestas $|\mathbf{E}|$ de uma árvore qualquer com $|\mathbf{V}|$ vértices é sempre $|\mathbf{V}| - 1$, então o número de vetores ciclo independentes é $c = |\mathbf{E}| - |\mathbf{V}| + 1$, também chamado de *número ciclomático* de G . Esta é a dimensão do seu espaço ciclo. Sabe-se que o espaço aresta é a soma direta do espaço ciclo com o espaço cociclo de um grafo [17]. Deste fato pode-se observar que a dimensão do espaço aresta é $|\mathbf{V}| - 1$, e que pode-se gerar qualquer vetor do espaço aresta através de uma combinação linear única de vetores do espaço ciclo e do espaço cociclo.

Exemplo 3.2.1. *Veja como primeiro exemplo o grafo $K_2^{(3)}$ na Figura 3.7(a). Observe que o espaço aresta tem dimensão 3, e sua base é composta pelas arestas e_1, e_2 e e_3 . Um vetor deste espaço é, por exemplo, $2e_1 + 3e_2 - e_3$. O espaço ciclo tem dimensão $c = |\mathbf{E}| - |\mathbf{V}| + 1 = 3 - 2 + 1 = 2$, e pode-se tomar como elementos da base o ciclo verde $c_1 = e_1 - e_2$ e o ciclo amarelo $c_2 = e_2 - e_3$, como se vê em (b). Qualquer ciclo deste grafo pode ser gerado por estes dois elementos. Note por exemplo que o ciclo azul em (c) pode ser gerado pelos elementos da base através da simples combinação linear $c_1 + c_2 = e_1 - e_3$. Como em $K_2^{(3)}$ o espaço aresta tem dimensão 3 e o espaço ciclo tem dimensão 2, então o espaço cociclo tem dimensão 1. Um exemplo de cociclo centrado em U pode ser visto em (d); é claro que ele gera todos os elementos do espaço cociclo, em particular gera o cociclo que é visto em (e), centrado em V . Um exemplo mais simples é o buquê B_2 , que se vê em (f). Ele não possui cociclos, e possui dois ciclos e_1 e e_2 , seus dois laços. Observe que o espaço ciclo tem dimensão $c = |\mathbf{E}| - |\mathbf{V}| + 1 = 2 - 1 + 1 = 2$, a mesma do espaço aresta, como era esperado, uma vez que não há cociclos.*

Exemplo 3.2.2. *Um exemplo menos trivial é o grafo da Figura 3.8. Observe que a base do espaço aresta é composta pelas arestas orientadas e_1, \dots, e_{12} , ou seja, tem dimensão 12. Na figura podem ser vistos em destaque dois exemplos de cociclos: $e_1 + e_9 - e_4$ e $e_7 - e_6 - e_{11}$. Também há dois exemplos de ciclos: $e_1 + e_2 + e_3 + e_4$ e $e_5 + e_6 + e_7 + e_8$. Como o número ciclomático é $c = 12 - 8 + 1 = 5$, o espaço ciclo tem dimensão 5. Consequentemente, o espaço cociclo tem dimensão 7.*

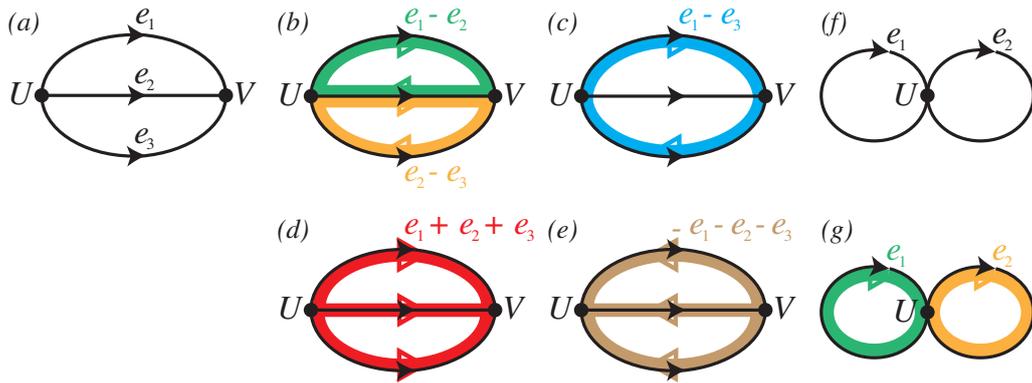


Figura 3.7: O grafo $K_2^{(3)}$ em (a), o buquê B_2 em (f) e exemplos de ciclos e cociclos.

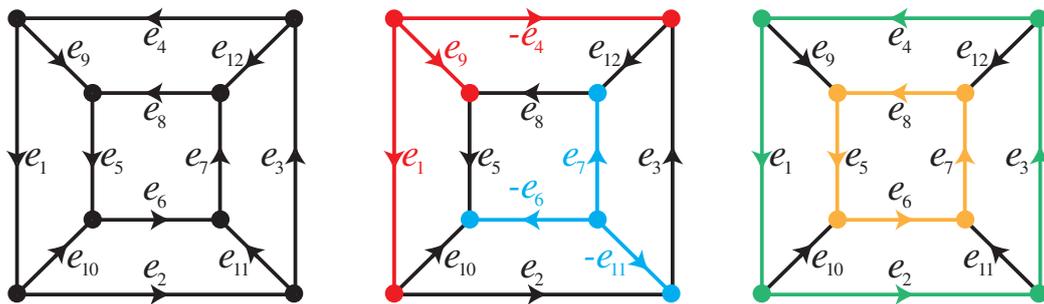


Figura 3.8: Respectivamente, um grafo com uma orientação, exemplos de cociclos e exemplos de ciclos.

3.3 Automorfismos de Grafos

Os automorfismos são permutações do conjunto de vértices de um grafo que respeitam as relações de incidência, e serão ferramentas utilizadas futuramente para explicitar as possíveis isometrias de um grafo quando mergulhado num espaço Euclidiano. Tais permutações podem fixar vértices, arestas, subgrafos ou não apresentar nenhum elemento fixo, assemelhando-se conceitualmente a rotações, reflexões e translações num espaço Euclidiano. Deve-se, no entanto, ressaltar que grafos são entidades abstratas que não precisam estar mergulhadas em nenhum espaço, da mesma forma que automorfismos não podem ser tratados como isometrias. Antes de definir automorfismos de grafos, pode-se observar a seguir o conceito preliminar de homomorfismos de grafos.

Definição 3.3.1. Um **homomorfismo** de um grafo $G = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$ sobre um grafo $G' = (\mathbf{V}', \mathbf{E}')$ é um par $f_V : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}'$ e $f_E : \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}'$ de aplicações, respeitando a função de incidência: $f_E(e) = f_V(A)f_V(B)$ para $e = AB \in \mathbf{E}$. Se as funções são bijetivas, então há um **isomorfismo de grafos**.

Naturalmente, pode-se definir um automorfismo de grafos quando há um isomorfismo e $G = G'$.

Definição 3.3.2. Um **automorfismo** de G é um par f_V e f_E de funções bijetivas de V e E em si mesmos respeitando a função de incidência: $f_E(e) = f_V(A)f_V(B)$ para $e = AB$. Em outras palavras, um automorfismo é uma permutação de vértices e arestas respeitando as relações de incidência.

Automorfismos possuem um papel importante no estudo da estrutura dos grafos, e a sua maior característica é preservar distâncias, ou seja: **se f é um automorfismo num grafo G , então $d_G(U, V) = d_G(f(U), f(V))$ para todos U, V vértices de G .** Para a descrição topológica da classe de grafos que será estudada neste trabalho serão ainda mais importantes os automorfismos limitados, cuja definição pode ser vista abaixo.

Definição 3.3.3. Um automorfismo f é dito um automorfismo **limitado** se a distância entre qualquer vértice e sua imagem por f é uniformemente limitada por alguma constante, ou seja, $d_G(U, f(U)) \leq M$ para todo U em V . Chama-se **norma** de f o máximo valor de $\{d_G(U, f(U))\}$, para todo U em V . Denota-se a norma de f por $|f|$.

É claro que qualquer automorfismo num grafo finito é limitado; no entanto, o foco será o estudo de grafos infinitos, onde os automorfismos limitados terão papel central. Automorfismos limitados foram pela primeira vez citados em 1983 por Trofimov ([18] e [19]), e redescobertos de forma independente em 2005 por Eon [20].

Um automorfismo limitado é dito *local* quando o número de vértices permutados é finito, ou seja, quando o suporte é finito. Já foi definido que um automorfismo f atua livremente em G se não há elementos fixados, ou seja: $f(X) \neq X$ para todo $X \in V \cup E$. Como um automorfismo é uma permutação de vértices e arestas que preserva adjacência, às vezes utiliza-se a notação de permutação para representá-los. Por exemplo, (A, B) é o automorfismo que envia A em B e B em A , e fixa todos os demais vértices. O automorfismo (A, B, C) é o que envia A em B , B em C e C em A , e fixa todos os demais vértices. O grupo de automorfismos de um grafo N é denotado $Aut(N)$. O grupo de automorfismos limitados de um grafo N , subgrupo normal de $Aut(N)$ (tal verificação é feita em [20]), é denotado $\mathcal{B}(N)$. Quando não houver perigo de confusão, será denotado apenas por \mathcal{B} . Diz-se que um grafo G é *vértice-transitivo* quando entre quaisquer dois de seus vértices, por exemplo, A e B , sempre há em $Aut(G)$ um automorfismo f tal que $f(A) = B$.

Exemplo 3.3.1. Observe o exemplo na Figura 3.9. O automorfismo ϕ nesta figura deixa fixado o vértice E . Já o automorfismo ρ deixa fixado o caminho DEF . Ambos são automorfismos de ordem finita. O último automorfismo não fixa nem vértices nem arestas, e possui ordem infinita. Ele envia cada A_i num A_{i+1} , $i \in \mathbb{N}$. Na Figura 3.10 pode-se ver um automorfismo que fixa um vértice em (a) e um automorfismo que atua livremente em (b) de subgrafos infinitos de grafos infinitos. Embora

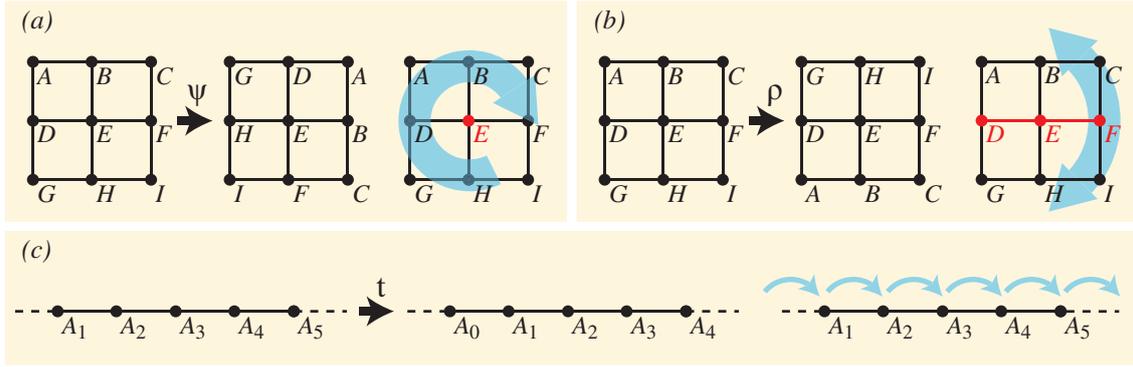


Figura 3.9: Exemplos de automorfismos: em (a), ψ possui um vértice fixo; em (b), ρ possui um caminho fixo; em (c), t não possui elementos fixos. Em vermelho, os elementos fixados são destacados.

ambos sejam automorfismos, somente o segundo é um automorfismo limitado. Observe que no primeiro, o vértice e sua imagem se distanciam infinitamente à medida que a distância até o ponto fixo aumenta.

Exemplo 3.3.2. Na Figura 3.11 observam-se alguns automorfismos limitados de ordem finita: em (a), o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$ de ordem 2 é um automorfismo limitado (a máxima distância entre um vértice e sua imagem é 1), e em (b) o automorfismo limitado $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$, também de ordem 2. Ainda em (b), veja que existem automorfismos limitados locais. Por exemplo, (B_1, C_1) , onde somente os vértices B_1 e C_1 não são fixados. Isto não pode ocorrer em (a), pois neste caso as células estão fortemente correlacionadas. Veja em (c) que a permutação (B_2, C_2) , por exemplo, obriga a trocas (B_1, C_1) e (B_3, C_3) . Estas, por sua vez, obrigam as trocas (B_0, C_0) e (B_4, C_4) , e assim sucessivamente, caracterizando o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$ quando tais trocas se propagam infinitamente em ambos os sentidos. Tais correlações entre células serão estudadas no Capítulo 7. Note que o grafo em (b) não é vértice-transitivo: por exemplo, não há automorfismos levando um vértice B_i num vértice A_j , para quaisquer $i, j \in \mathbb{N}$.

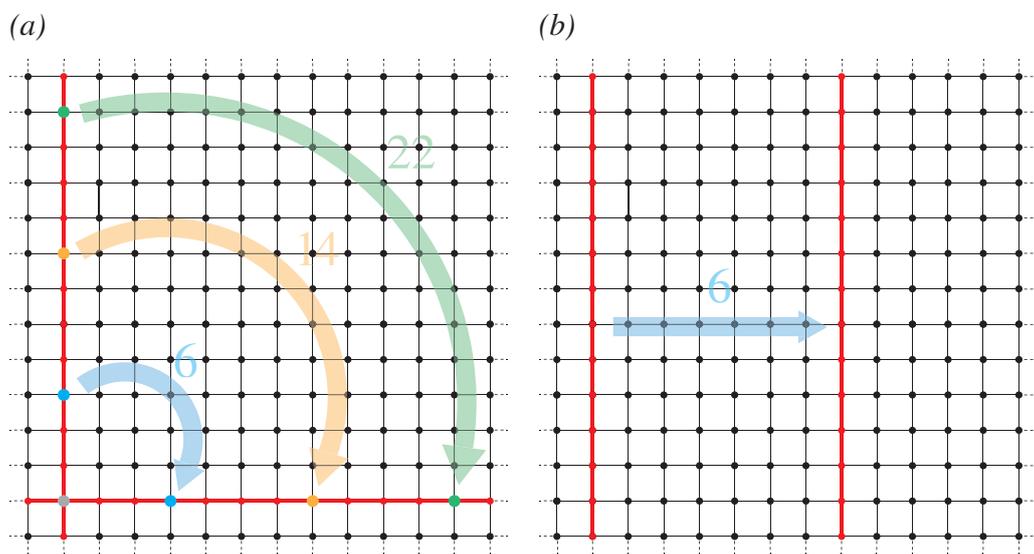


Figura 3.10: Um automorfismo com um ponto fixo (a) e um automorfismo sem pontos fixos (b) num grafo infinito. Veja que o primeiro não é um automorfismo limitado: as distâncias entre um vértice e sua imagem aumentam conforme aumenta a distância até o ponto fixo.

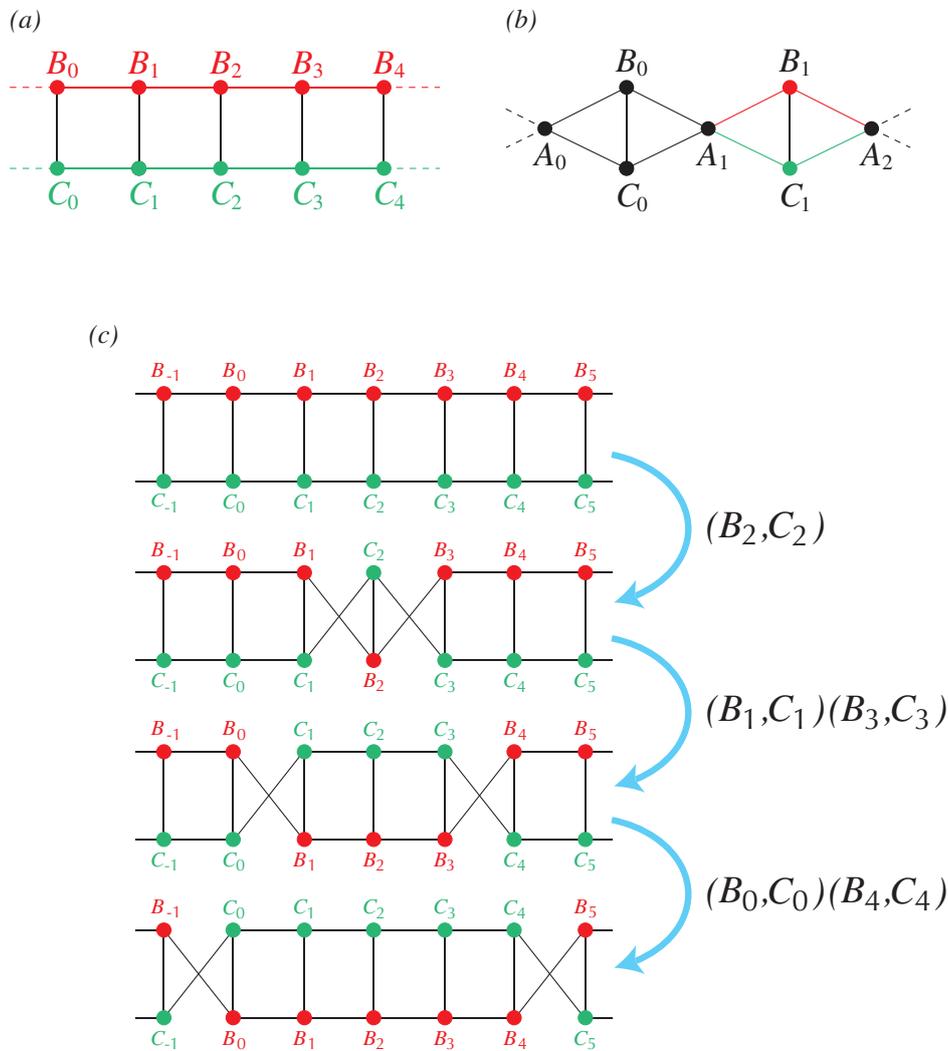


Figura 3.11: Exemplos de automorfismos limitados que não possuem ordem infinita: em (a), o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$. Repare que a distância entre um vértice e sua imagem é 1; em (b), pode-se observar (B_i, C_i) , para todo $i \in \mathbb{Z}$ do mesmo tipo de (a), e automorfismos limitados locais (B_1, C_1) , que não podem ocorrer em (a): veja em (c) a cadeia de permutações iniciada por (B_2, C_2) e que culmina convergindo para o automorfismo $\prod_{i \in \mathbb{Z}} (B_i, C_i)$ quando as trocas se propagam infinitamente em ambos os sentidos.

Capítulo 4

Conceitos de Redes Periódicas

4.1 Redes Periódicas e Representações

Grafos infinitos são utilizados para a modelagem topológica da estrutura de um cristal ([21] e [22]). Como referência recomenda-se [23]. Neste capítulo serão utilizados os conceitos de Teoria de Grafos e de Teoria de Grupos introduzidos nos dois capítulos anteriores para a definição e a análise da estrutura de grafos periódicos. O primeiro conceito a ser introduzido é aquele que reúne as características fundamentais de tais grafos, de modo a explicitar as informações mais relevantes do cristal ao pesquisador interessado.

Definição 4.1.1. *Uma rede é um grafo simples 3-conexo localmente finito [24].*

Para modelar a estrutura de um cristal, composto por uma quantidade enorme de átomos, serão usadas com frequência redes infinitas.

Exemplo 4.1.1. *Veja dois exemplos de redes infinitas na Figura 4.1: a rede quadrada (**sql**) e a rede hexagonal (**hcb**). Algumas redes serão identificadas por três letras, conforme os símbolos do banco de dados de redes cristalinas da Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR) [25].*

Fazendo uma observação de ordem química, embora não essencial ao que se segue, a 3-conectividade não é uma condição tão restritiva quanto parece. Por exemplo, a topologia de algumas estruturas cristalinas com átomos 2-coordenados, como oxigênio em zeólitos, é estritamente representada por um grafo 2-conexo. Por convenção, o grafo é então *contraído*, isto é: toda ligação $A - O - B$, onde O tem grau 2, é substituída por uma simples ligação AB . O grafo resultante é 3-conexo e nenhuma informação topológica foi perdida. Veja na Figura 4.2 uma ilustração da estrutura da faujazita.

Em alguns momentos a teoria exige também o estudo de grafos similares a redes, mas com relaxamento da condição relativa à 3-conectividade. Tais grafos serão chamados grades.

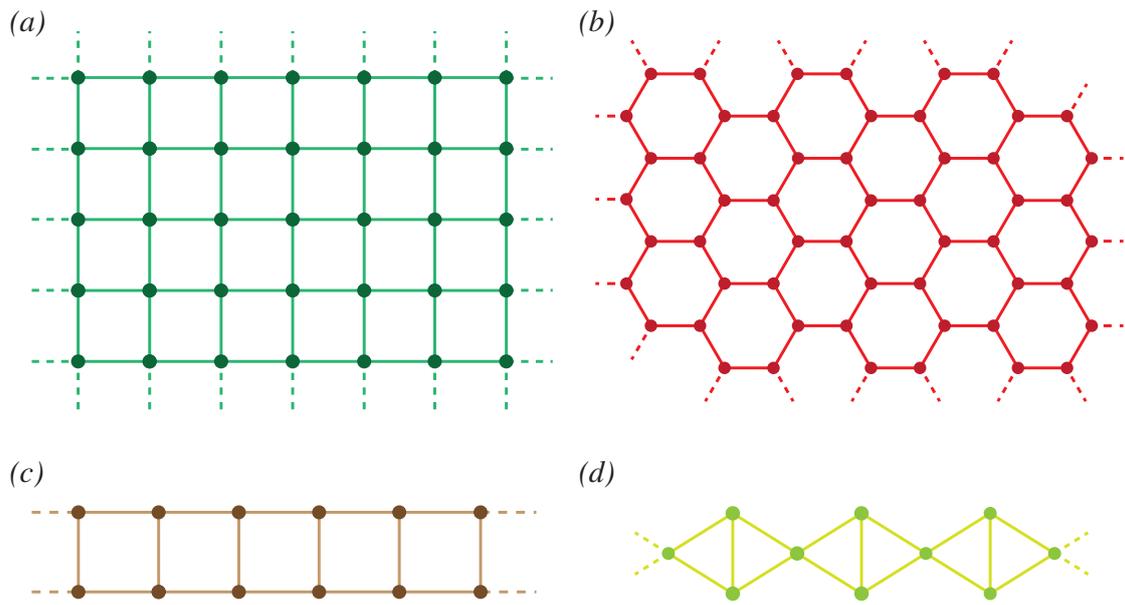


Figura 4.1: Exemplos de redes infinitas em (a) e (b). Em (a) a rede quadrada (**sql**). Em (b) a rede hexagonal (**hcb**). Duas grades infinitas em (c) e (d).

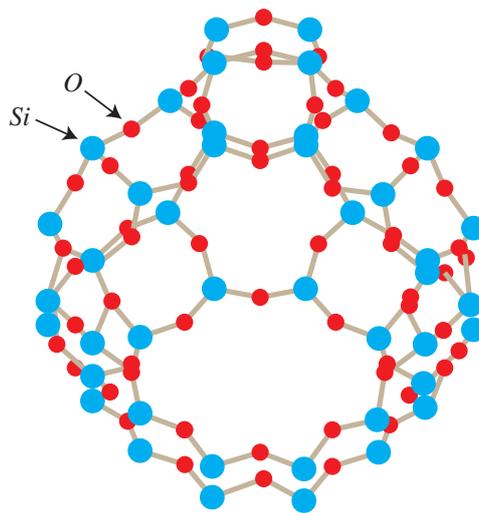


Figura 4.2: Algumas estruturas cristalinas, como a faujazita, deveriam ser modeladas por redes que admitem grau 2 em seus vértices. Mas isto pode ser contornado utilizando-se uma contração, sem perdas topológicas [2].

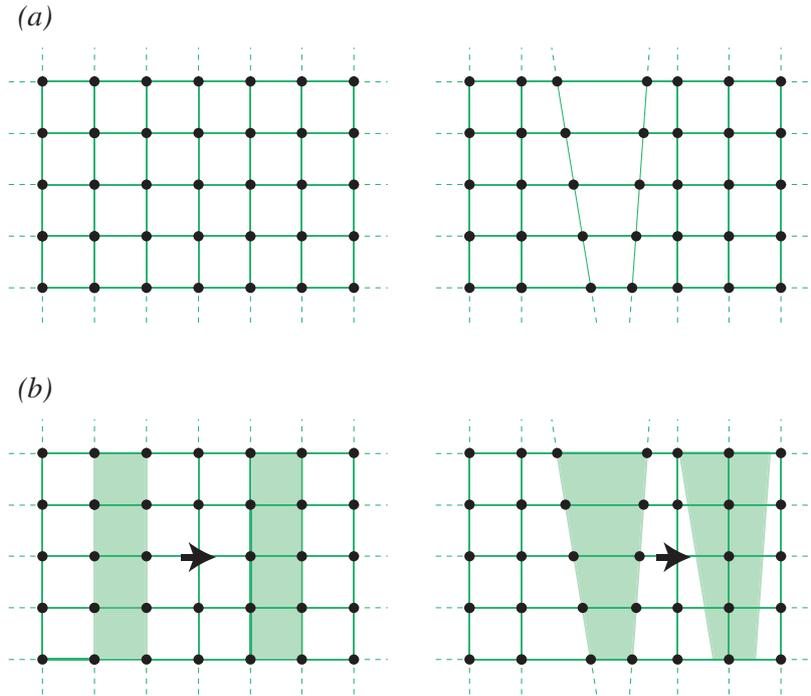


Figura 4.3: Em (a), as duas estruturas são topologicamente indistinguíveis. Em (b), pode-se ver que na esquerda os automorfismos são mais facilmente identificados, já que há mais simetrias.

Definição 4.1.2. Uma **grade** é um grafo simples conexo localmente finito.

Exemplo 4.1.2. Veja na Figura 4.1 exemplos de grades. A grade infinita em (c) é chamada de grafo escada. Grades serão frequentemente utilizadas nos próximos capítulos.

Enquanto a topologia das estruturas cristalinas é bem descrita por redes, a geometria delas pode ser idealizada pelo que será chamado de representações de redes num espaço Euclideano. Veja na Figura 4.3 que, embora em (a) ambas as estruturas sejam topologicamente equivalentes, e representem a mesma rede abstrata, em (b) são identificados mais facilmente os automorfismos na figura da esquerda, onde há mais simetrias. Redes são entidades abstratas, definidas sem a necessidade de se escolher uma métrica para que sejam consideradas as distâncias geométricas entre seus elementos, ou o tamanho de seus elementos. Mas para uma melhor visualização de certos automorfismos é mais vantajosa uma representação.

Definição 4.1.3. Uma **representação** ρ de um grafo no espaço Euclideano é uma aplicação de vértices e arestas em pontos e segmentos, respectivamente, de maneira que $\rho(e) = \rho(U)\rho(V)$ para $e = UV$. O grafo correspondente a uma dada representação é chamado **grafo subjacente** a esta representação. Também eventualmente será usada a palavra representação quando for feita referência à imagem da aplicação ρ no espaço Euclideano.

Quando não houver risco de confusão, a representação de uma rede poderá ser chamada apenas de rede. Neste trabalho, sempre que houver referência a um ponto de uma representação, este será oriundo de um vértice da rede subjacente, e um segmento sempre será imagem de uma aresta da rede subjacente. Em outras palavras, não serão importantes pontos ou segmentos interiores a segmentos que já representam arestas da rede subjacente.

Enquanto automorfismos são importantes ferramentas para o estudo das características intrínsecas de uma rede abstrata, as simetrias de uma representação de uma rede são exploradas através de isometrias do espaço Euclidiano.

Definição 4.1.4. *Uma **isometria** no espaço Euclidiano M é uma aplicação $f : M \rightarrow M$ que preserva distâncias segundo a métrica Euclidiana, ou seja, $d_E(A, B) = d_E(f(A), f(B))$, para todo ponto $A, B \in M$.*

Embora a estrutura do cristal seja infinita, ela possui padrões que se repetem periodicamente. Ao serem identificados estes padrões, podem ser mais bem resumidas as características de uma representação da rede, que a princípio seriam infinitas. As ferramentas que se têm à disposição para identificar estes padrões que se repetem infinita e periodicamente no espaço Euclidiano são isometrias chamadas translações.

Definição 4.1.5. *Uma **translação** na direção do vetor $P \in M$ no espaço Euclidiano é uma isometria $t^* : M \rightarrow M$ tal que $t^*(V) = V + P$, para todo ponto $V \in M$.*

As translações formam um subgrupo \mathcal{T}^* do grupo das isometrias no espaço Euclidiano. As translações mais importantes neste trabalho serão as que preservam a representação dentro do espaço Euclidiano. Isto leva à introdução de uma importante classe de equivalência definida a seguir.

Definição 4.1.6. *Dois pontos A e B de uma representação $\rho(N)$ no espaço Euclidiano (oriundos de dois vértices de uma rede subjacente N) são ditos **translacionalmente equivalentes** se há uma translação t^* no espaço Euclidiano tal que $t^*(A) = B$ e $t^*(\rho(N)) = \rho(N)$. Analogamente definem-se segmentos (oriundos de arestas de uma rede subjacente) translacionalmente equivalentes.*

Convém agora dar nomes aos elementos translacionalmente equivalentes, de modo a deixar evidentes as direções para onde a rede se perpetua periodicamente. Para tal, são rotulados os elementos através de vetores (pelo chamado Método Vetorial [26]). Se existem n direções independentes de translação, uma delas a direção v , procedimento consiste em rotular primeiramente um conjunto maximal de pontos translacionalmente não equivalentes $\{A^{(1)}, B^{(2)}, \dots, A^{(k)}\}$ como origem $\{A^{(1)}_0, A^{(2)}_0, \dots, A^{(k)}_0\}$. Em seguida, rotular os translacionalmente equivalentes pelo

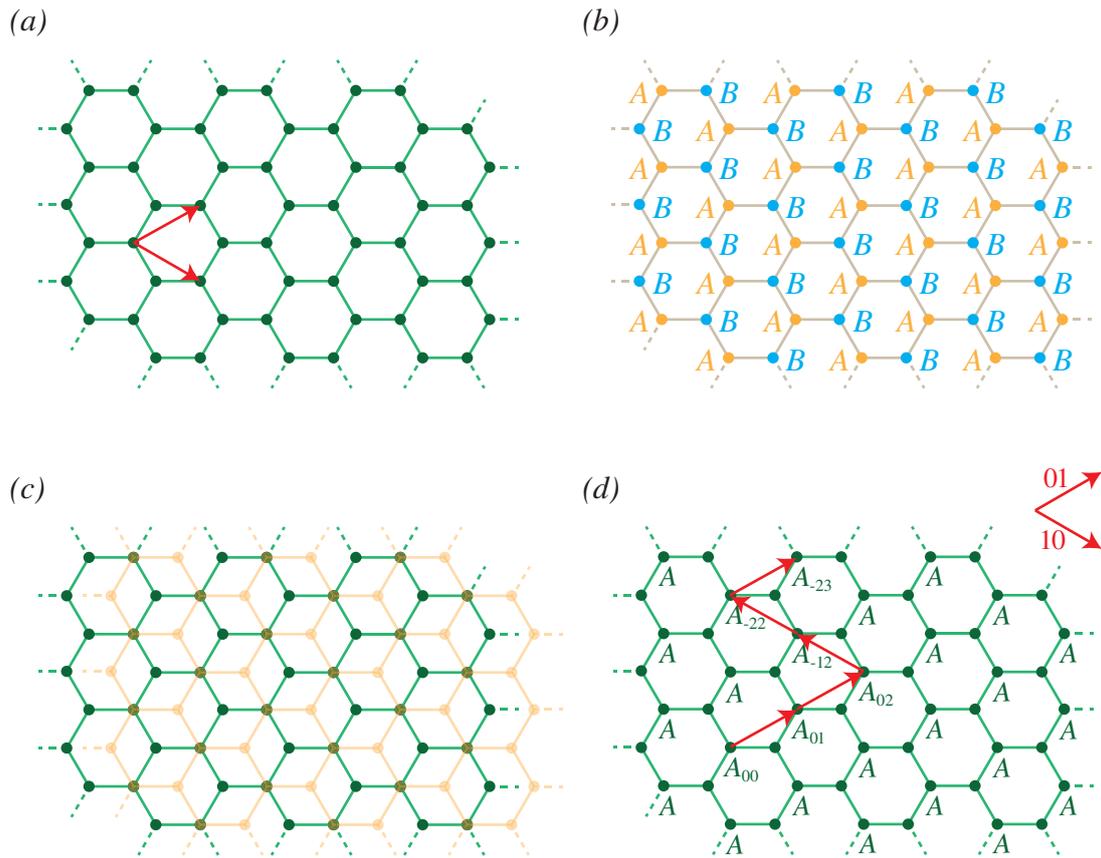


Figura 4.4: A rede hexagonal e direções independentes de translação.

vetor v como $\{A^{(1)}_v, A^{(2)}_v, \dots, A^{(k)}_v\}$. Desta forma, toda a representação pode ser rotulada. De forma análoga pode-se proceder para a rotulação das arestas.

Assim, por exemplo, se os pontos A , B e C são translacionalmente não equivalentes, e há três direções independentes para onde podem ser transladados os mesmos, o que será feito primeiramente é renomear cada ponto como A_{000} , B_{000} e C_{000} . Repare que, para não poluir demais as figuras, será utilizada a notação xyz para um vetor, ao invés de (x, y, z) . Dando prosseguimento à rotulação, se o padrão se repete na direção 100, então os primeiros pontos equivalentes nesta direção serão rotulados como A_{100} , B_{100} e C_{100} . E assim procedendo, pode-se rotular todos os pontos da representação da rede que correspondem a vértices da rede.

As classes de elementos translacionalmente equivalentes serão chamadas de *retículos*, definição que será reforçada quando se iniciar o estudo dos quocientes. Pontos translacionalmente equivalentes correspondentes a vértices na rede subjacente estarão agrupados num mesmo *ponto-retículo*, e segmentos translacionalmente equivalentes correspondentes a arestas na rede subjacente estarão colecionadas num mesmo *segmento-retículo*. Repare que um retículo é uma órbita de um elemento obtida através da ação do grupo de translações do espaço Euclidiano que preserva a representação.

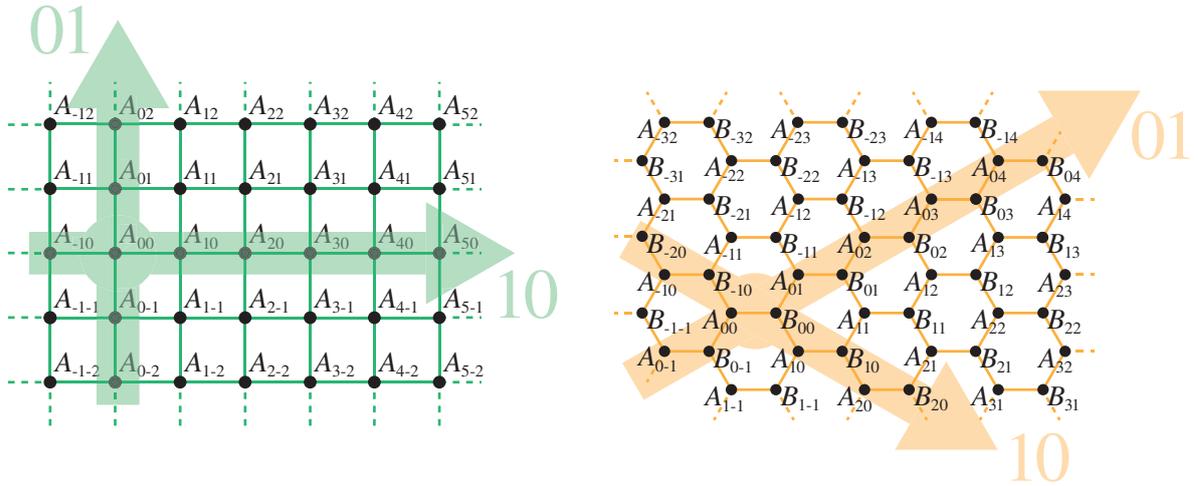


Figura 4.5: A rede quadrada e a rede hexagonal rotuladas. Em destaque duas direções independentes em cada rede.

Exemplo 4.1.3. Veja na Figura 4.4 esquemas que usam como base uma representação ρ da rede hexagonal **hcb**. Na parte (a), duas direções independentes para onde os padrões de ρ se repetem e para onde se pode transladar ρ sobre si mesma, caracterizando a translação. Na parte (b) são vistas duas classes de pontos que são equivalentes por translações que preservam ρ , ou seja, pontos A são levados em pontos A via translações que preservam ρ , e o mesmo ocorre com os pontos B . Raciocínio análogo para os segmentos. Repare em (c) que não é possível levar um ponto A num ponto B através de uma translação da representação ρ inteira. Por isso foram escolhidas letras diferentes para nomeá-los, e cada letra representa uma classe de pontos translacionalmente equivalentes. Em (d) rotulam-se alguns pontos utilizando-se as direções $(1, 0)$ e $(0, 1)$ das translações, que se abrevia para 10 e 01. O grupo de translações neste caso é isomorfo ao grupo $(\mathbb{Z}^2, +)$.

Exemplo 4.1.4. Na Figura 4.5 são vistas duas representações das redes **sql** e **hcb** completamente rotuladas.

Translações que preservam a representação de uma rede N induzem automorfismos de ordem infinita em N , também chamados de *automorfismos translacionais*, ou simplesmente *translações* quando não houver risco de confusão. Se há três classes de vértices A , B e C , por exemplo, então um automorfismo translacional na direção P é dado por $(A_i, A_{i+P})(B_i, B_{i+P})(C_i, C_{i+P})$. Desta forma, o grupo de translações \mathcal{T}^* no espaço Euclidiano que preservam a representação induz um grupo de automorfismos translacionais \mathcal{T} na rede subjacente, e naturalmente um ponto-retículo de uma representação induz um *vértice-retículo* na rede subjacente, e um segmento-retículo de uma representação induz uma *aresta-retículo* na rede subjacente. É evidente que os retículos no grafo abstrato independem da escolha da representação; depen-

<i>rede N</i>	<i>representação $\rho(N)$ de N</i>
<i>vértice</i>	<i>ponto</i>
<i>aresta</i>	<i>segmento</i>
<i>automorfismo</i>	<i>isometria</i>
<i>translação</i>	<i>translação</i>
<i>vértice-retículo</i>	<i>ponto-retículo</i>
<i>aresta-retículo</i>	<i>segmento-retículo</i>
$d_G(U, V)$	$d_E(U, V)$
$Aut(N)$	<i>grupo de isometrias de $\rho(N)$</i>
<i>grupo de translações \mathcal{T}</i>	<i>grupo de translações \mathcal{T}^*</i>

Figura 4.6: Correspondência entre conceitos equivalentes de redes e de representações de redes.

dem apenas da existência de automorfismos translacionais. Na Figura ??, alguns conceitos correspondentes em redes e representações de redes.

Definição 4.1.7. Diz-se que o par (N, \mathcal{T}) é uma **rede p -periódica** se N é uma rede e $\mathcal{T} \leq Aut(N)$ é um grupo livre abeliano de posto p , tal que o número de vértice-retículos e aresta-retículos por \mathcal{T} em N é finito. Diz-se neste caso que a rede tem **periodicidade p** .

O grupo \mathcal{T} é dito grupo de translação de (N, \mathcal{T}) e atua livremente sobre N [4]. Na Figura 4.5 são vistas duas redes 2-periódicas totalmente rotuladas, e estão em destaque as direções independentes. Na Figura 3.11, redes 1-periódicas rotuladas.

Definição 4.1.8. Um **grupo de espaço \mathcal{E}** de posto p é um grupo que possui um subgrupo normal \mathcal{T} livre abeliano de posto p , tal que \mathcal{E}/\mathcal{T} é finito e tal que o centralizador de \mathcal{T} em \mathcal{E} é o próprio \mathcal{T} [6].

Definição 4.1.9. **Redes cristalográficas** são redes p -periódicas cujo grupo de automorfismos é isomorfo a algum grupo de espaço de posto p [24].

Um grupo de espaço de uma rede p -periódica corresponde a um grupo de isometrias no espaço Euclideano. Mais especificamente, é o grupo que corresponde ao grupo de simetrias de um cristal ideal, ou seja, com todos os átomos nas suas posições atômicas ideais. Consiste num grupo cujos elementos são translações e operações de simetria pontuais. Há 17 grupos de espaço de posto 2, e 230 de posto 3. Tais grupos foram estudados e listados no século XIX. Uma definição abstrata pode ser encontrada em [6].

Definição 4.1.10. Diz-se que uma rede periódica é uma rede **não cristalográfica** (rede NC) se o seu grupo de automorfismos não é isomorfo a nenhum grupo de espaço de posto p .

Com os recursos métricos de um espaço Euclidiano, é o momento de definir uma representação que explore a periodicidade da rede p -periódica.

Definição 4.1.11. Uma representação ρ é dita uma **representação p -periódica** se algum grupo de translação \mathcal{T}^* no espaço Euclidiano pode ser isomorficamente associado a \mathcal{T} através da aplicação $*$: $t \rightarrow t^*$ tal que $\rho(t(U)) = t^*(\rho(U))$ para todo $t \in \mathcal{T}$ e $U \in \mathbf{V}$.

Um resultado muito importante é que **os únicos automorfismos limitados que uma rede cristalográfica pode apresentar são as translações** (demonstrado em [20]). Consequentemente, a mais evidente característica de uma rede NC é apresentar algum automorfismo limitado que não é uma translação. Considere a Figura 3.11. Há duas grades NC 1-periódicas, e pode-se claramente observar o automorfismo limitado (B_i, C_i) em (a), que troca todos os vértices B_i com os vértices C_i , para todo \mathbb{Z} , e o automorfismo limitado (B_1, C_1) em (b), que troca o vértice B_1 com o vértice C_i . Nenhum dos dois é translação. Exemplos menos triviais serão vistos nos próximos capítulos.

4.2 Grafos Quociente e Grafos de Voltagem

Trabalhar com grafos infinitos obviamente é um inconveniente. Como na rede periódica já foi visto que há padrões que se repetem em certas direções independentes, obtidos através de translações nestas direções, pode-se obter um grafo finito formado pelos vértice-retículos e pelos aresta-retículos. Em outras palavras, pode-se obter o que se chama de grafo quociente, um grafo finito que ainda carrega informações importantes sobre a rede periódica (N, \mathcal{T}) , tais como graus e incidência ([26], [27]).

Se (N, \mathcal{T}) é uma rede periódica, denota-se respectivamente por \mathbf{V}/\mathcal{T} e \mathbf{E}/\mathcal{T} os conjuntos de vértice-retículos e aresta-retículos de N por \mathcal{T} , e $q_{\mathcal{T}}$ a função que envia um elemento (vértice ou aresta) X ao seu retículo $[X]$, que consiste nos elementos translacionalmente equivalentes a X (embora a notação $[X]$ seja utilizada para órbitas em geral, de agora em diante será utilizada apenas para retículos).

Definição 4.2.1. O **grafo quociente** é o grafo $N/\mathcal{T} \equiv (\mathbf{V}/\mathcal{T}, \mathbf{E}/\mathcal{T}, m_{\mathcal{T}})$, onde $m_{\mathcal{T}}$ é dada por $m_{\mathcal{T}}([e]) = ([A], [B])$ para uma aresta $e = AB \in \mathbf{E}$.

A função $q_{\mathcal{T}}$ é dita a *projeção natural* de (N, \mathcal{T}) sobre seu grafo quociente N/\mathcal{T} . Se uma origem A_0 é escolhida em cada vértice-retículo $[A]$ da rede e cada vértice é

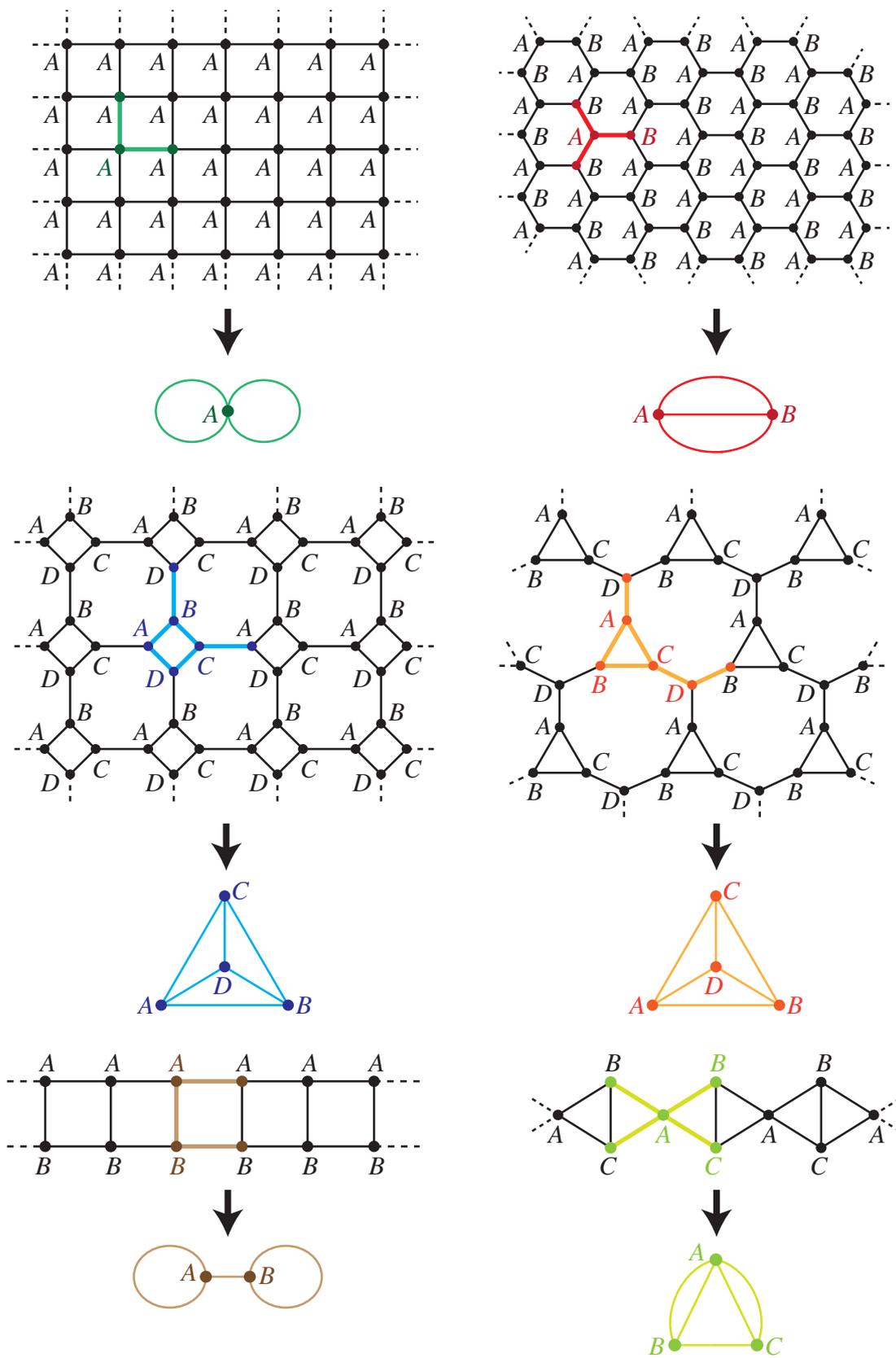


Figura 4.7: Algumas redes e grades periódicas, bem como os seus respectivos grafos quociente. Em destaque nas redes e grades, alguns subgrafos fundamentais.

indexado pela translação t que envia nele a origem do respectivo retículo, pode-se associar a cada aresta $[e] = [A][B]$ do grafo quociente o índice t da aresta $A_0B_t \in [e]$. A correspondência entre a rede e o *grafo quociente rotulado* é biunívoca, a menos de escolha de base e origem para os vértice-retículos e aresta-retículos. Uma ferramenta utilizada em demonstrações de teoremas relacionados a redes periódicas é o subgrafo fundamental:

Definição 4.2.2. *Seja (N, \mathcal{T}) uma rede periódica. Um subgrafo conexo de N cujo conjunto de arestas é um conjunto maximal de arestas translacionalmente não equivalentes é definido como **subgrafo fundamental**.*

Observe que um subgrafo fundamental contém uma, e apenas uma aresta representativa de cada aresta-retículo, ou seja, é um domínio fundamental (Definição 2.1.8) do conjunto das arestas de N por \mathcal{T} . Mas obviamente há vértices translacionalmente equivalentes num subgrafo fundamental, já que a rede é conexa. No entanto, isto não prejudica a utilidade deste conceito. Veja na Figura 4.7 alguns subgrafos fundamentais em destaque colorido nas redes e grades.

Em Cristalografia, a célula unitária é um domínio fundamental de \mathbb{R}^n associado ao grupo de translação de um cristal, por exemplo, um paralelogramo em \mathbb{R}^2 , ou um paralelepípedo em \mathbb{R}^3 . Se o grupo de translação for maximal, a célula é dita primitiva, caso contrário ela é dita centrada. Neste trabalho, este conceito será adaptado para redes periódicas, e por vezes utilizado em demonstrações.

Definição 4.2.3. *Se (N, \mathcal{T}) é uma rede periódica, uma **célula unitária** é um domínio fundamental do conjunto de vértices de N pelo grupo de translações \mathcal{T} . Se o grupo de translações for maximal, a célula unitária é dita **célula primitiva**.*

Exemplo 4.2.1. *Por exemplo, a rede quadrada, **sql**, é uma rede 2-periódica com um vértice e duas arestas translacionalmente não equivalentes por subgrafo fundamental. Como cada aresta liga dois vértices do mesmo vértice-retículo, o grafo quociente da **sql** por seu grupo de translação é o grafo com um vértice e dois laços neste vértice, chamado buquê B_2 . Como qualquer aresta da **sql** liga um vértice U ao vértice transladado $t(U)$, onde t é a translação 10 ou 01 , associa-se uma destas translações a cada laço de B_2 . Com essa associação, B_2 univocamente representa a rede quadrada. Veja na Figura 4.8 em dois passos, quando agrupam-se vértices equivalentes da rede primeiro pela translação 10 , em seguida pela 01 , obtendo como grafo quociente o buquê B_2 .*

Exemplo 4.2.2. *É fundamental para a unicidade que o grafo quociente seja orientado e rotulado. Veja na Figura 4.9, na parte (a), um exemplo onde há duas redes não isomorfas com o mesmo grafo quociente não rotulado. A situação é resolvida orientando e rotulando os grafos, como se pode ver em (b).*

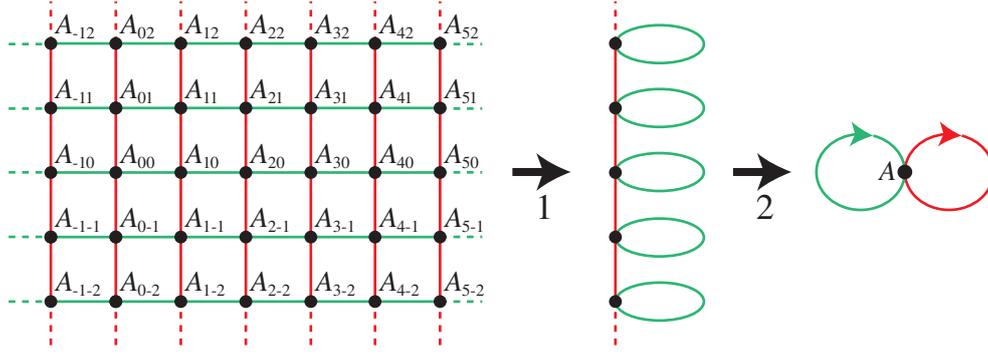


Figura 4.8: O grafo quociente da rede quadrada em dois passos. Primeiro identificando vértices e arestas equivalentes via a translação horizontal, em seguida identificando via a translação vertical.

Exemplo 4.2.3. Observe na Figura 4.10a um exemplo de grafo quociente obtido de um subgrupo de \mathcal{T} de índice 2 da rede quadrada **sql**. Nas partes (b) e (c) há dois grafos isomorfos, mas com grafos quociente diferentes devido a escolhas diferentes de origens de vértice-retículos.

Exemplo 4.2.4. Podem ser observadas na Figura 4.11 três redes periódicas distintas geradas alterando-se apenas os rótulos do grafo quociente, o buquê B_2 .

Grafos quociente rotulados são um caso especial de grafos de voltagem, que serão definidos agora. Novamente serão associados rótulos aos elementos de um grafo, mas estes rótulos não precisam necessariamente ser elementos de \mathbb{Z}^n . Podem ser elementos de um grupo abeliano ou não abeliano, generalizando a ideia de rótulo ao que passa a se chamar voltagem.

Uma *atribuição de voltagem* num grupo Λ sobre um grafo G com uma orientação σ é uma aplicação $\alpha : E^\pm \rightarrow \Lambda$ tal que $\alpha(e^+)\alpha(e^-) = 1$. Desta forma, define-se um grafo de voltagem a seguir.

Definição 4.2.4. Seguindo [28], um **grafo de voltagem** (G, α) é dado por um grafo G com uma orientação e uma atribuição $\alpha : \mathbf{E} \rightarrow \Lambda$ do conjunto de arestas de G a um grupo arbitrário Λ , possivelmente não abeliano, tal que $\alpha(e^+)\alpha(e^-) = 1$, para todo $e \in \mathbf{E}$, onde 1 é a identidade do grupo.

Definição 4.2.5. A **voltagem** sobre um caminho orientado $w = r_1 r_2 \dots r_n$ é o produto das voltagens ao longo das arestas orientadas de w na mesma ordem: $\alpha(r_1)\alpha(r_2)\dots\alpha(r_n)$.

Seja G um grafo de voltagem (que neste caso chama-se de grafo *base*), com conjunto de vértices \mathbf{V} e conjunto de arestas \mathbf{E} , e com voltagens consistindo em geradores do grupo Λ . Pode-se gerar, a partir do grafo base G , um grafo único, chamado grafo *derivado* G^α .

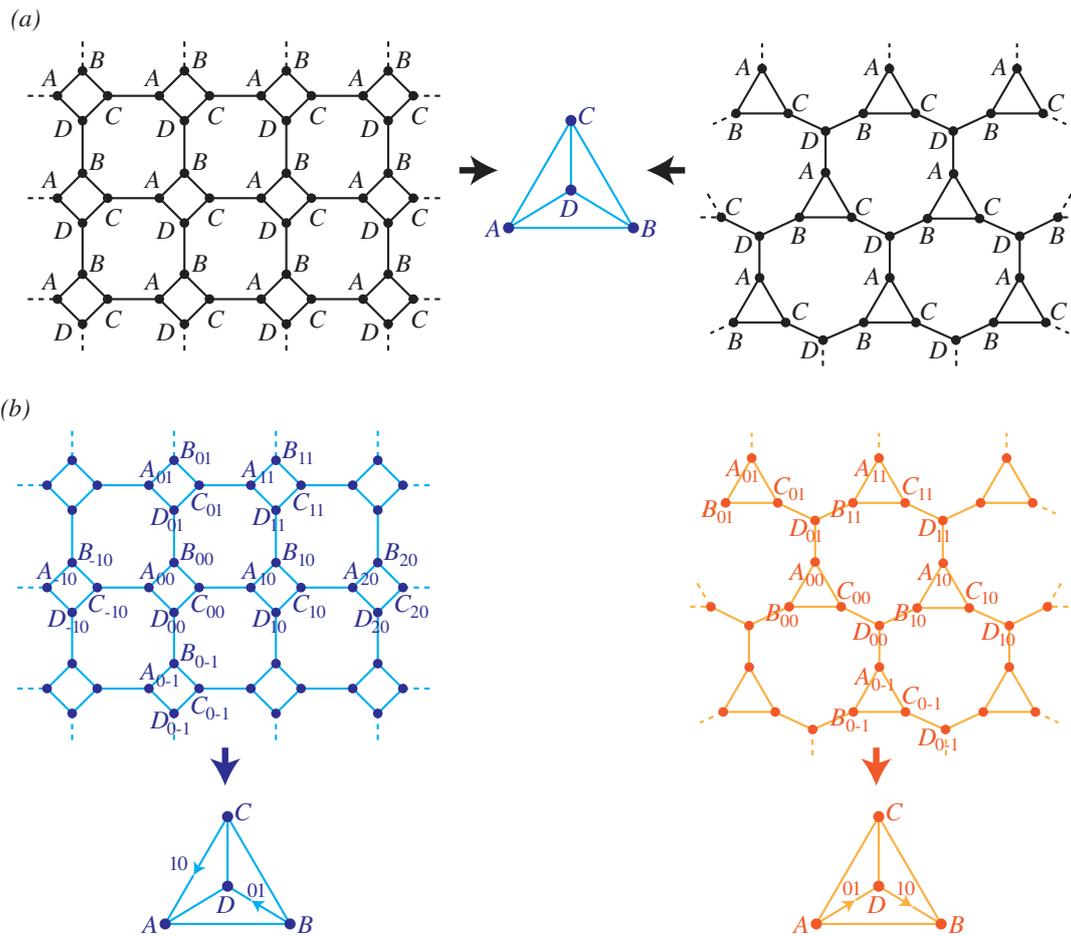


Figura 4.9: Em (a), as redes não isomorfas possuem o mesmo grafo quociente. Em (b), orientando e rotulando, consegue-se a unicidade.

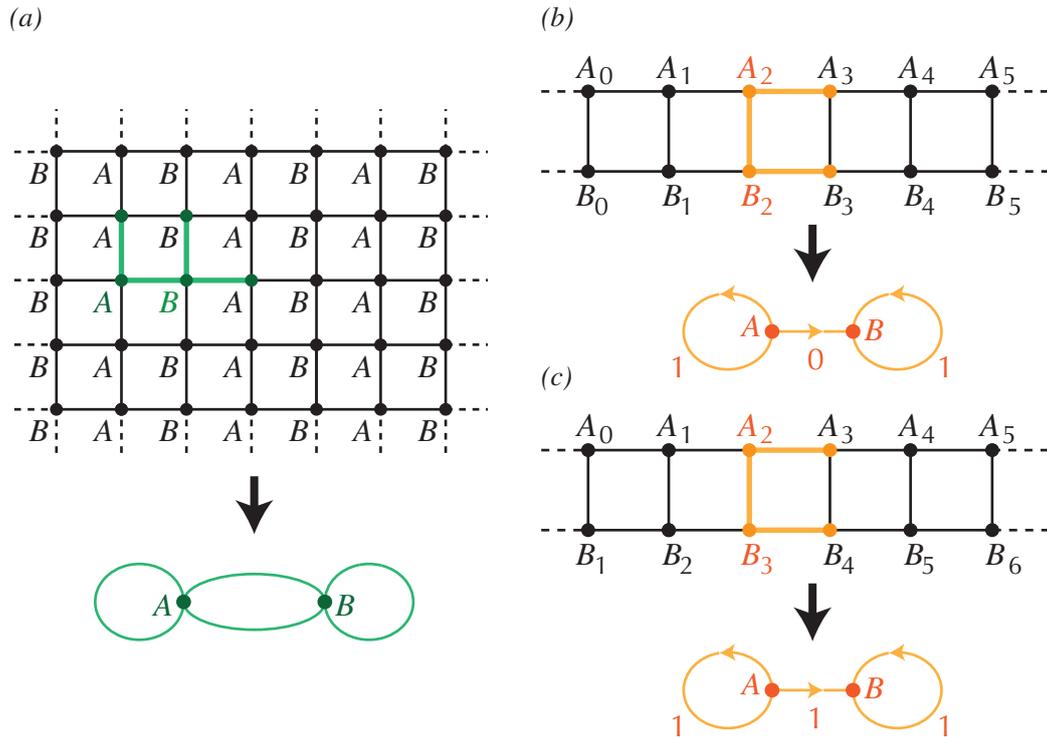


Figura 4.10: Em (a), um quociente finito da rede quadrada obtido a partir de um subgrupo de \mathcal{T} de índice 2. Em (b) e (c) duas escolhas diferentes de origens para os vértice-retículos, gerando grafos escada isomorfos.

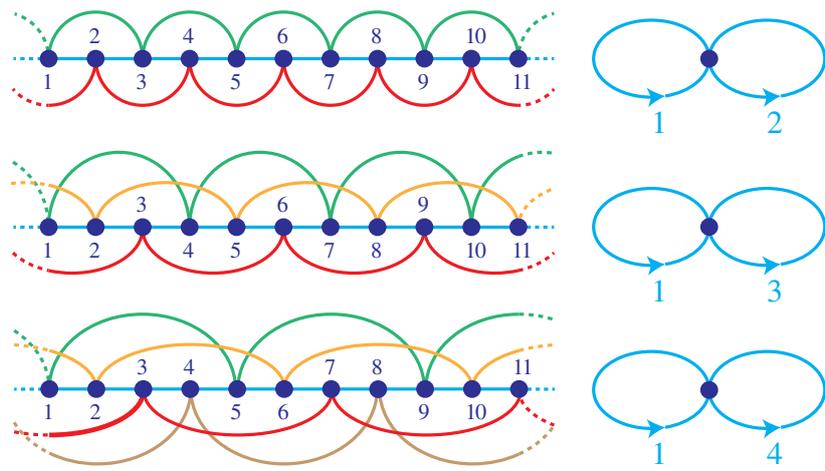


Figura 4.11: Três exemplos de um mesmo grafo quociente, mas com voltagens diferentes, gerando três redes diferentes.

Definição 4.2.6. O **grafo derivado** é um grafo orientado com conjunto de vértices $V \times \Lambda$, conjunto de arestas $E \times \Lambda$ e relação de incidência $(e, a) \sim (u, a)(v, ab)$ se $e = uv$ tem voltagem b . Usa-se frequentemente a notação abreviada $(u, a) = u_a$ de modo que a relação de incidência se lê $e_a = u_a v_{ab}$ [28].

Se as voltagens das arestas consistem em um conjunto de elementos que não gera Λ , o grafo derivado é desconexo [28]. Uma importante propriedade é o fato de que o grupo Λ atua livremente no grafo derivado G^α se a ação de $f \in \Lambda$ no vértice (ou aresta) $x_a \in G^\alpha$ é dada por $f(x_a) = x_{fa}$. Esta propriedade assegura que a projeção natural que envia $x_a \in G^\alpha$ em $x \in G$ é uma projeção *regular*, isto é, para cada vértice, o conjunto de arestas com orientação para fora (respectivamente, com orientação para dentro) é mapeado biunivocamente no conjunto de arestas com orientação para fora (respectivamente, com orientação para dentro) na sua imagem.

O procedimento para encontrar o grafo derivado de um grafo base será chamado de **procedimento base-derivado**. Duas observações devem ser feitas durante este procedimento: uma com respeito à indexação dos vértices e arestas do grafo derivado e outra com relação à ação do grupo Λ sobre o grafo derivado. Ocorre uma peculiaridade nestes dois processos: na indexação, a **ação à direita** da voltagem b na definição da função de incidência; na ação do grupo Λ , a **ação à esquerda** do automorfismo f sobre a voltagem a . Se o grupo é não abeliano, ações à direita e à esquerda não se equivalem.

Exemplo 4.2.5. Como um exemplo simples de um grafo de voltagem, pode-se tomar o buquê B_2 com vértice U onde os dois laços l e l' têm atribuídas as voltagens 0 e 1 , respectivamente, em $\mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ (o grupo aditivo $\{0, 1, 2\}$ satisfazendo $1 + 2 = 0$). O grafo derivado conseqüentemente possui três vértices U_i , $i \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$ e seis arestas l_i e l'_i , $i \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z}$. Uma aresta l_i começa em U_i e vai até $U_{i+0} = U_i$ e é conseqüentemente um laço em U_i ; uma aresta l'_i começa em U_i e vai até U_{i+1} de maneira que as três arestas derivadas do laço l'_i formam um triângulo. Veja este exemplo na Figura 4.12.

Exemplo 4.2.6. Agora será visto um exemplo mais complexo. Seja o grafo base o buquê B_2 , com arestas a e b , vértice U , e com voltagens 12 e 123 do grupo não abeliano S_3 . Pode-se acompanhar com a Figura 4.13 e com a Figura 4.14. Será construído o grafo derivado. Para a indexação dos vértices do grafo derivado, é importante ressaltar que a voltagem atua à direita. Por exemplo, para descobrir-se quem é o vértice adjacente a U_{12} via a voltagem 12 , faz-se $U_{12,12} = U_e$. Para se descobrir quem é o vértice adjacente a U_{23} via a voltagem 12 , faz-se $U_{23,12} = U_{132}$. O vértice adjacente a U_{13} via a voltagem 123 é o $U_{13,123} = U_{12}$. O vértice U_{123} via a voltagem 123 é adjacente ao vértice $U_{123,123} = U_{132}$. Fazendo isso em todos os vértices consegue-se uma indexação completa. A indexação das arestas é mais simples: a aresta r_k sai do vértice X_k , orientada desta forma.

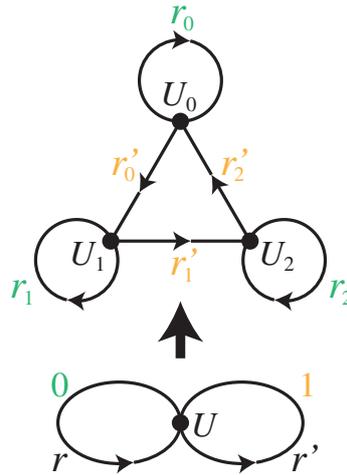


Figura 4.12: Um exemplo onde o buquê B_2 com voltagens é o grafo base e o triângulo com laços é seu grafo derivado.

Exemplo 4.2.7. *Será dada continuidade ao exemplo anterior, mas agora, ao invés de indexar os vértices, a busca é pela imagem da ação do grupo \mathcal{S}_3 sobre o grafo derivado. É importante ressaltar que para a ação de automorfismos, a voltagem atua à esquerda. Será chamado de ϕ_{12} o automorfismo associado a 12 de \mathcal{S}_3 . Para descobrir quem é a imagem do vértice U_{23} via ϕ_{12} , faz-se $U_{12.23} = U_{123}$. Para a imagem do vértice U_{12} via ϕ_{12} , faz-se $U_{12.12} = U_e$. Será chamado analogamente de ϕ_{123} o automorfismo associado a 123 de \mathcal{S}_3 . Para descobrir quem é a imagem do vértice U_e via ϕ_{123} , faz-se $U_{123.e} = U_{123}$. Para a imagem do vértice U_{13} via ϕ_{123} , faz-se $U_{123.13} = U_{23}$. Pode-se acompanhar esses exemplos na Figura 4.14. A ação de \mathcal{S}_3 sobre subgrafos também será importante mais adiante. As imagens da ação de ϕ_{12} e ϕ_{123} sobre os principais ciclos do grafo derivado são vistas na Figura 4.15.*

Uma rede periódica é dita *minimal* quando possui periodicidade máxima, ou seja, quando a periodicidade da rede é igual ao número ciclomático do seu grafo quociente. Uma rede minimal é sempre uma rede cristalográfica [29].

Exemplo 4.2.8. *Observe que na Figura 4.7 as redes quadrada e hexagonal são minimais, pois sua 2-periodicidade corresponde ao número ciclomático $a - v + 1 = 2$. Por outro lado, as redes associadas ao quociente K_4 nesta figura são 2-periódicas, ou seja, não são minimais, uma vez que o número ciclomático do K_4 é igual a 3.*

4.3 Fibras Geodésicas

Alguns invariantes topológicos podem ser ferramentas importantes no estudo da estrutura dos grafos. Um exemplo são os anéis fortes.

Definição 4.3.1. *Um **anel** num grafo G é um ciclo que não possui atalhos em G .*

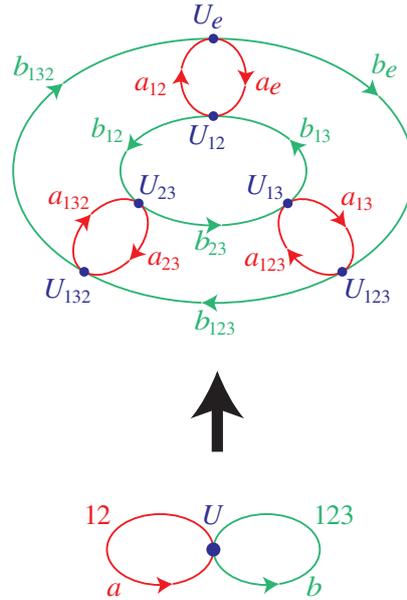


Figura 4.13: Exemplo de um grafo base e seu grafo derivado.

Um **anel forte** é um ciclo que não pode ser escrito como soma de ciclos menores. [30].

Exemplo 4.3.1. Na Figura 4.16 podem ser vistos dois anéis fortes em (a) e (b). A soma destes anéis gera o ciclo que não é um anel, representado em (c). Em (d), um anel que não é um anel forte.

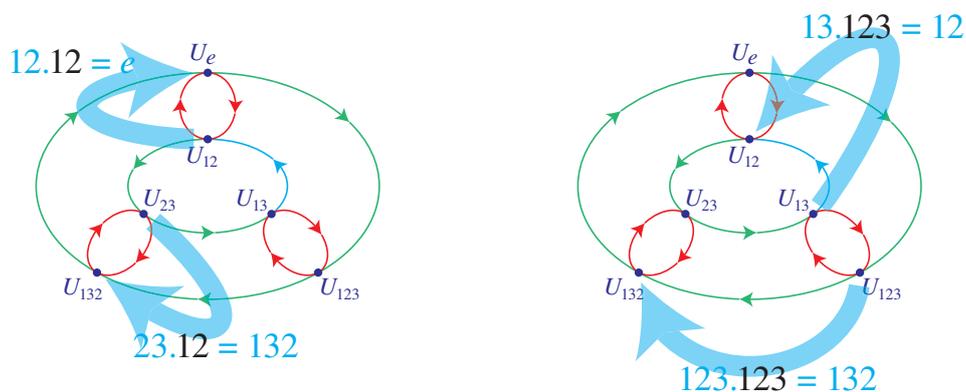
Os conceitos definidos nos próximos parágrafos como geodésicas e geodésicas fortes podem ser interpretadas como os correspondentes infinitos dos anéis e dos anéis fortes. Assim como estes últimos são importantes para o estudo da estrutura de um grafo finito, redes periódicas são estruturadas fundamentalmente por geodésicas e fibras geodésicas.

Definições e propriedades de caminhos geodésicos e fibras podem ser encontrados em detalhes em [29]. Foi visto no capítulo anterior que caminho é um passeio que não passa duas vezes pelo mesmo vértice. Também foi visto que um caminho geodésico (ou simplesmente uma geodésica) é um caminho de comprimento mínimo entre dois vértices, e que distância $d_G(U, V)$ entre dois vértices é o comprimento de um caminho geodésico entre tais vértices.

É denotada por $Ext(t)$ a extensão maximal 1-periódica em \mathcal{T} do subgrupo $\langle t \rangle$ gerada por alguma translação $t \in \mathcal{T}$. O *comprimento reduzido* de um passeio fechado ou de uma combinação de ciclos P de N/\mathcal{T} com voltagem t é definido por P/k , onde k é o índice de $\langle t \rangle$ em $Ext(t)$.

Seja (N, \mathcal{T}) um grafo periódico. Um subgrafo F de N é dito *geodesicamente completo* em N se, para qualquer par de vértices de F , F contém todas as geodésicas de N entre eles. Um importante invariante topológico de um grafo periódico é o que

INDEXAÇÃO: COMPOSIÇÃO À DIREITA



AÇÃO DE AUTOMORFISMO: COMPOSIÇÃO À ESQUERDA

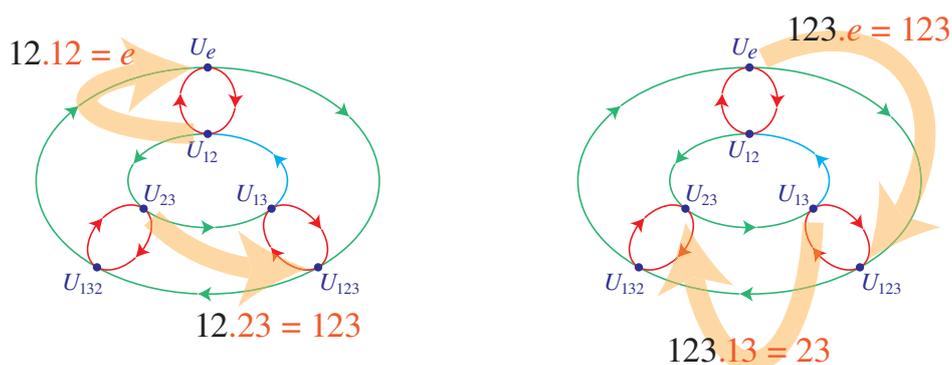


Figura 4.14: Exemplos de quando a composição dos elementos de \mathcal{S}_3 ocorre à direita, no caso da indexação dos vértices do grafo derivado, e de quando a composição ocorre à esquerda, quando buscam-se as imagens dos automorfismos do grupo isomorfo ao \mathcal{S}_3 que atua no grafo derivado.

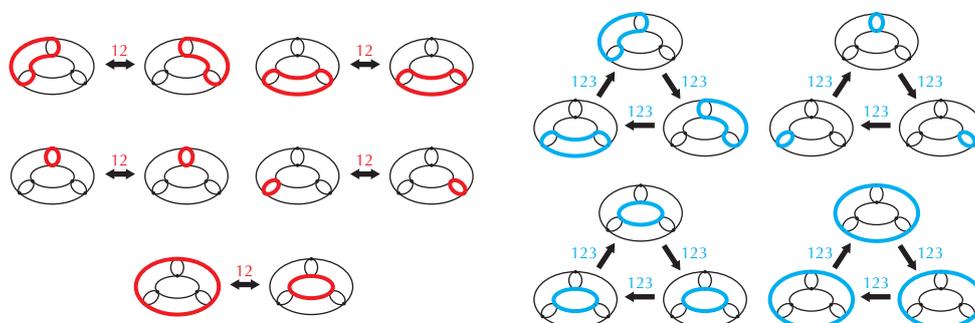


Figura 4.15: Imagens de vários ciclos via automorfismos induzidos pelos elementos 12 e 123 de \mathcal{S}_3 . Repare que 12 atua como uma reflexão, como um espelho; e 123 como uma rotação no sentido horário.

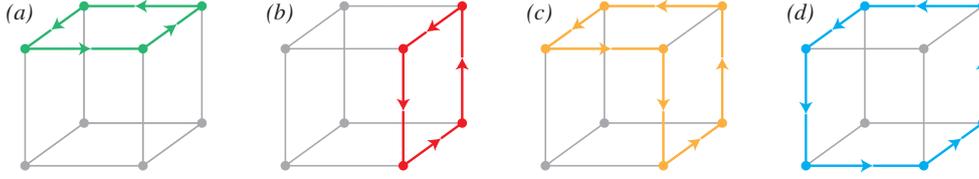


Figura 4.16: Exemplos de anéis fortes em (a) e (b), e um ciclo gerado pela soma destes anéis em (c). Um exemplo de anel que não é um anel forte pode ser visto em (d).

foi definido em [29] como fibra geodésica.

Definição 4.3.2. Uma **fibra geodésica** (F, \mathcal{S}) é um subgrafo 1-periódico de (N, \mathcal{T}) onde:

- (a) o grupo de translações $\mathcal{S} = \langle t \rangle$ pode ser gerado por $t \in \mathcal{T}$;
- (b) o subgrafo F é geodesicamente completo em N ;
- (c) F é minimal com respeito à periodicidade (a) e à completude (b).

Duas fibras geodésicas $(F_1, \langle s \rangle)$ e $(F_2, \langle t \rangle)$ são ditas *paralelas* se $Ext(s) = Ext(t)$. Uma *geodésica forte* numa rede periódica é definida como um caminho infinito nos dois sentidos que contém o único caminho geodésico na rede entre qualquer par de seus vértices. Uma geodésica forte numa rede periódica (N, \mathcal{T}) é projetada sobre um ciclo do grafo quociente N/\mathcal{T} de menor comprimento reduzido. Importantes resultados sobre fibras geodésicas foram demonstrados em [29] e serão listados a seguir:

- P_1 . Qualquer rede p -periódica (N, \mathcal{T}) admite fibras geodésicas ao longo de pelo menos p direções independentes.
- P_2 . O grafo quociente F/\mathcal{S} de uma fibra geodésica é um subgrafo do grafo quociente N/\mathcal{T} da rede.
- P_3 . Em qualquer rede periódica, automorfismos limitados mapeiam fibras geodésicas em fibras geodésicas paralelas. (Uma geodésica forte é levada numa geodésica forte paralela por qualquer automorfismo limitado).
- P_4 . Automorfismos limitados com vértices fixos possuem ordem finita.

Exemplo 4.3.2. Exemplos de alguns destes conceitos básicos podem ser observados na Figura 4.17. Em (a), há um caminho infinito α , ou seja, um passeio com uma quantidade infinita de vértices nos dois sentidos, com uma única condição: α nunca percorre um mesmo vértice duas vezes. Em (b), uma geodésica infinita β : dados dois vértices A e B em β , qualquer caminho contido em β ligando A e B é um caminho geodésico, ou seja, de comprimento mínimo. Em (c), uma geodésica forte γ : dados

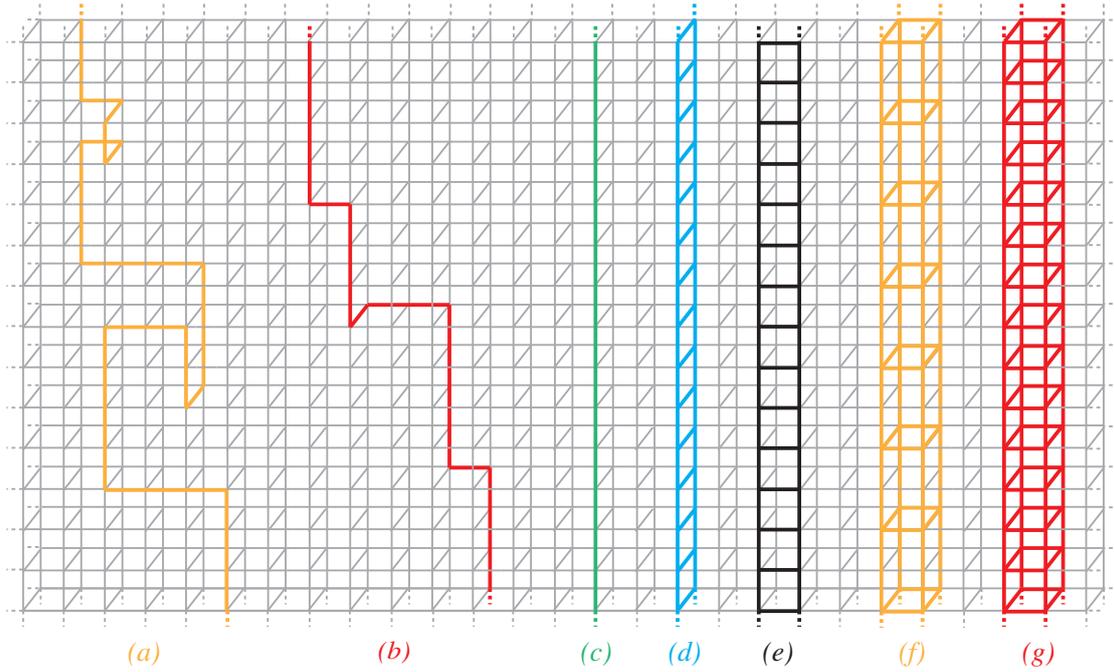


Figura 4.17: Alguns grafos infinitos da rede quadrada dupla: (a) um caminho infinito (que claramente não é geodésica), (b) uma geodésica infinita, (c) uma geodésica forte (que é uma fibra), (d) e (e) duas escadas 1-periódicas que são geodesicamente completas, (f) um grafo 1-periódico geodesicamente incompleto cujo grupo de translação é subgrupo de índice 2 do grupo de translação do grafo 1-periódico de (g), que é geodesicamente completo.

em γ dois vértices A e B , γ contém todos os caminhos geodésicos da rede ligando A e B . Observe que γ também é uma fibra. Em (d) e (e), subgrafos geodesicamente completos isomorfos δ_1 e δ_2 , chamados escadas. Em (f): algumas arestas que faltam na no grafo 1-periódico ϵ o tornam geodesicamente incompleto, ou seja, dados dois vértices A e B de ϵ , nem todas as geodésicas que ligam A e B estão contidas em ϵ . Em (g), um grafo 1-periódico geodesicamente completo λ : dados dois vértices A e B de λ , todas as geodésicas que ligam A e B estão contidas em λ . No entanto, não é minimal: contém um grafo linear isomorfo a γ , que de fato é uma fibra geodésica.

Algumas propriedades de fibras geodésicas são ferramentas importantes nas demonstrações de resultados relacionados a redes periódicas. Por exemplo, se duas fibras geodésicas α e β são paralelas e possuem um vértice em comum, então $\alpha = \beta$. Outros são menos intuitivos: se um automorfismo limitado fixa um vértice de uma fibra geodésica, então toda a fibra geodésica é fixada. Na Figura 4.18 pode-se observar mais uma propriedade: por um vértice (em verde) não necessariamente passam fibras geodésicas nas duas direções. Mas pela propriedade P_1 , sabe-se que há fibras geodésicas nas duas direções. Mais resultados importantes podem ser encontrados em [29].

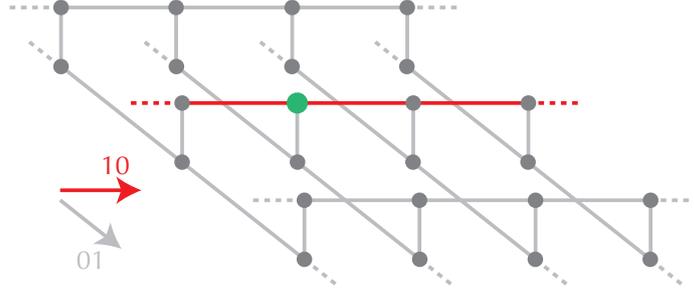


Figura 4.18: Por um mesmo vértice do grafo haltere (bidimensional) não passam fibras geodésicas nas duas direções ao mesmo tempo.

4.4 Representações Baricêntricas

A partir do momento que se passa a distinguir os tamanhos das arestas e o ângulo entre as mesmas, a nova tarefa passa a ser a busca por uma representação padrão, com propriedades simples, para representar o grafo infinito original. Para se encontrar tal representação, necessita-se de um melhor entendimento da relação dos espaços ciclo e cociclo do grafo quociente com a disposição dos pontos e segmentos na representação. Uma análise mais profunda pode ser encontrada em [4].

O espaço ciclo do grafo quociente está diretamente relacionado com as translações na representação. Cada ciclo representa uma eventual direção para onde os padrões da rede podem se repetir. Isto porque um ciclo com voltagem α no quociente começa num vértice X e termina no vértice X novamente; isto corresponde, na representação, a um caminho que começa em X_p e termina em $X_{p+\alpha}$, caracterizando uma direção α . Como a representação é periódica, α é uma direção que induz uma translação (eventualmente de vetor nulo) no grupo de translações da rede. Como cada ciclo estabelece uma direção para onde a rede é periódica, a periodicidade máxima da rede é igual ao número máximo de ciclos independentes existentes no grafo quociente, o que é definido como número ciclomático. Veja na Figura 4.19 que as voltagens de cada elemento da base do espaço ciclo são vetores que geram um espaço bidimensional.

Exemplo 4.4.1. Considere o exemplo do $K_2^{(3)}$ que gera a rede hexagonal (veja a Figura 4.19). O espaço aresta do grafo quociente $K_2^{(3)}$, como já foi visto, é gerado por três arestas: e_1 , e_2 e e_3 . A dimensão do espaço ciclo é igual ao número ciclomático: $c = |E| - |V| + 1 = 3 - 2 + 1 = 2$. Sejam $e_1 - e_2$ e $e_2 - e_3$ os vetores ciclo da base. Complementando o espaço ciclo existe o espaço cociclo, que tem dimensão 1 neste caso, uma vez que o espaço das arestas é a soma direta do espaço ciclo com o espaço cociclo.

Um cociclo já foi definido como a combinação linear de todas as arestas saindo de um certo vértice; um exemplo pode ser visto na Figura 4.19: em vermelho, o cociclo

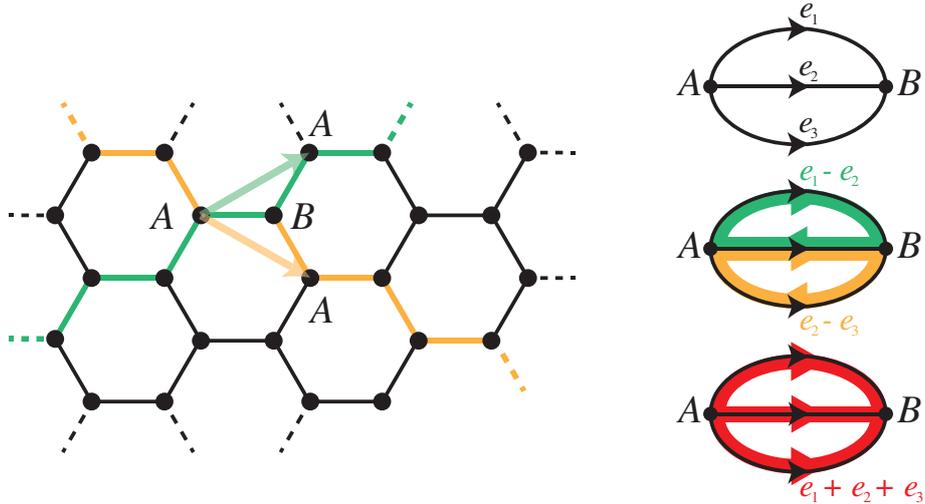


Figura 4.19: A rede hexagonal derivada do $K_2^{(3)}$.

$e_1 + e_2 + e_3$, soma das arestas que saem do vértice A . Os cociclos do grafo quociente serão de fundamental importância para se encontrar a representação mais simples de uma rede periódica. Nesta representação (de máxima simetria), cada vértice está localizado no centro de gravidade (baricentro) de seus vizinhos, e a relação de um vértice com seus vizinhos é exatamente o que um cociclo fornece.

Definição 4.4.1. Uma **representação baricêntrica** de uma rede periódica é uma representação periódica da rede onde cada ponto está localizado no centro de gravidade de seus vizinhos.

Para um grafo quociente com voltagens em \mathbb{Z}^p e uma base \mathcal{B}_p de \mathbb{R}^p , existe uma única representação baricêntrica da rede derivada com a dada base, a menos de translação [5]. Uma representação baricêntrica possui sempre máxima simetria [4].

Seja $\rho(N)$ uma representação baricêntrica da rede N . Se U é um vértice de N e V_i com $i = 1, \dots, k$ são seus vértices vizinhos, então chama-se *equação baricêntrica* a equação $\rho(U) = (\alpha_1\rho(V_1) + \dots + \alpha_k\rho(V_k))/(\alpha_1 + \dots + \alpha_k)$ que relaciona o ponto e seus vizinhos. Arestas de uma representação baricêntrica podem ter pesos $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ diferentes. Veja na Figura 4.20 duas representações baricênticas da rede hexagonal. Em (a), todas as arestas possuem o mesmo peso (equação baricêntrica $\rho(U) = (\rho(V_1) + \rho(V_2) + \rho(V_3))/3$), e em (b) a aresta vertical tem peso 2 (equação baricêntrica $\rho'(U) = (2\rho'(V_1) + \rho'(V_2) + \rho'(V_3))/4$).

Exemplo 4.4.2. Será finalmente obtida uma representação baricêntrica para a rede hexagonal. Sejam $\rho(e_1) = i$, $\rho(e_2) = j$ e $\rho(e_3) = k$ vetores da base ortonormal $\{i, j, k\}$ do \mathbb{R}^3 , e associadas a estes vetores, as voltagens 100, 010 e 001 do grupo \mathbb{Z}^3 como voltagens no grafo $K_2^{(3)}$. Isto vai gerar uma representação chamada *representação integral* (veja em [31]) da rede hexagonal no \mathbb{R}^3 , como se vê abaixo. Os pontos A estão contidos no plano $x + y + z = 0$ e os pontos tipo B estão contidos no plano

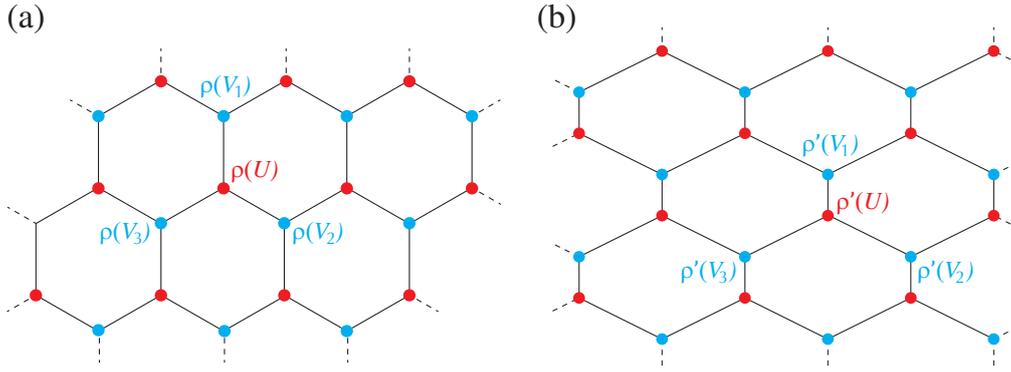


Figura 4.20: Em (a), uma representação baricêntrica ρ da rede hexagonal cujos segmentos representativos das arestas possuem pesos iguais. Em (b), outra representação baricêntrica ρ' da rede hexagonal, mas o segmento vertical possui peso duas vezes maior do que o peso dos demais.

$x+y+z = 1$ (para verificar observe que $\rho(A_{pq}) = p(i-j) + q(j-k) = pi + (q-p)j - qk$, com $p + (q-p) - q = 0$). Como há três arestas, o espaço ambiente é o \mathbb{R}^3 ; projetando tais pontos no espaço ciclo (dimensão 2), na direção do espaço cociclo (dimensão 1), obtém-se a representação baricêntrica. Isto porque quando se projeta na direção do espaço cociclo, os cociclos são mandados no zero. A direção do espaço cociclo é aquela dada pelo único vetor da base do espaço cociclo, que é o vetor $\rho(e_1 + e_2 + e_3) = 100 + 010 + 001 = 111$. Observe o desenho na Figura 4.22. Então deve-se projetar tais pontos na direção 111, sobre o espaço ciclo, que é o plano gerado pelos vetores $\rho(e_1 - e_2)$ e $\rho(e_2 - e_3)$, ou seja, deve-se projetar na direção 111 e sobre o plano $x + y + z = 0$. Olhando de maneira que o vetor 111 saia da página perpendicularmente, pode-se ver que a representação é a de máxima simetria, ou seja, com hexágonos regulares, como pode ser visto na rede hexagonal da Figura 4.1.

Um grande inconveniente da representação baricêntrica é o que se chama de colisão de vértices: quando a representação sobrepõe dois ou mais vértices num mesmo ponto do espaço Euclidiano.

Definição 4.4.2. Uma representação apresenta **colisão de vértices** se vértices diferentes são levados no mesmo ponto Euclidiano.

Exemplo 4.4.3. Um exemplo clássico onde ocorre colisão é o da rede periódica derivada do grafo quociente chamado grafo haltere. O grafo em questão é mostrado na Figura 4.23 abaixo, onde também se pode ver a rede derivada. Veja que, novamente, há dois planos que contêm os pontos A e os pontos tipo B. Na projeção no espaço ciclo, ocorre a superposição de pontos A e B, caracterizando a colisão, como se pode ver na Figura 4.24.

Definição 4.4.3. Uma rede periódica $(N, (T))$ que apresenta colisões de vértices em qualquer representação baricêntrica é dita uma **rede instável**.

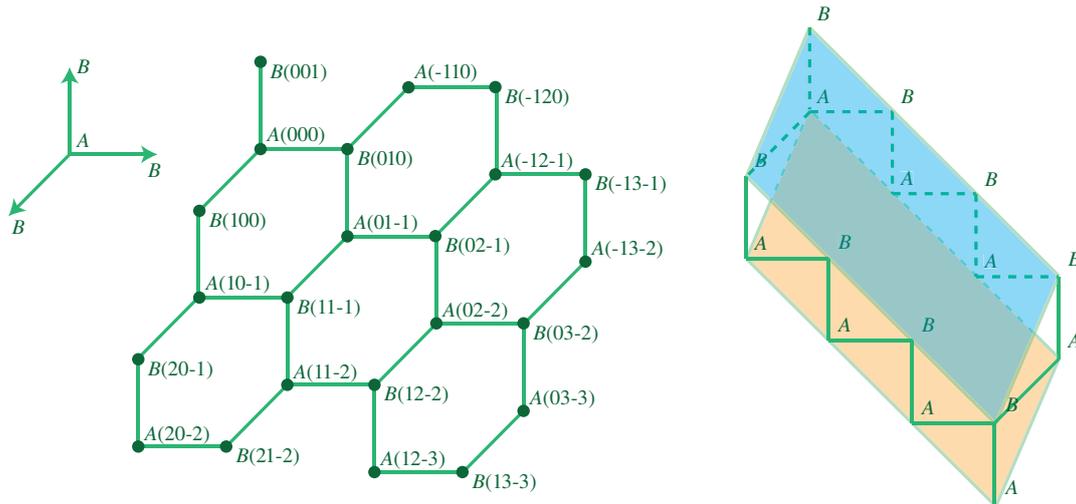


Figura 4.21: Representação integral da rede **hcb** derivada de $K_2^{(3)}$. Repare que os pontos tipo *A* estão contidos num plano, e os pontos tipo *B* estão contidos num plano paralelo.

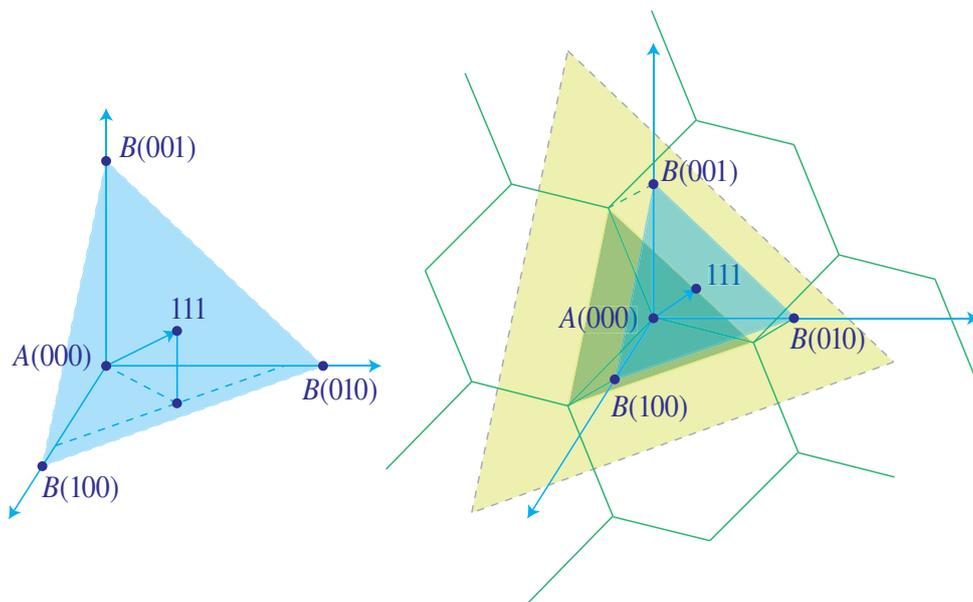


Figura 4.22: Projetando a representação sobre o espaço ciclo, na direção do espaço cociclo gerado pelo vetor 111.

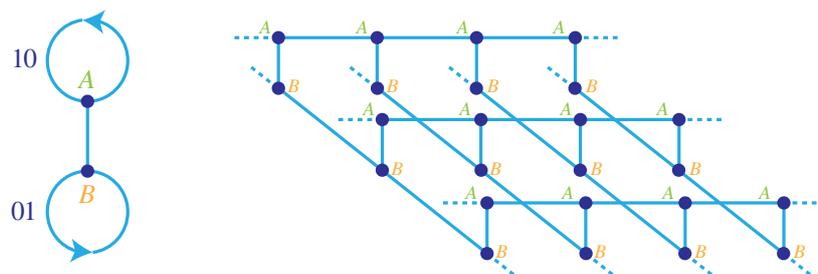


Figura 4.23: Grafo haltere e sua rede derivada.

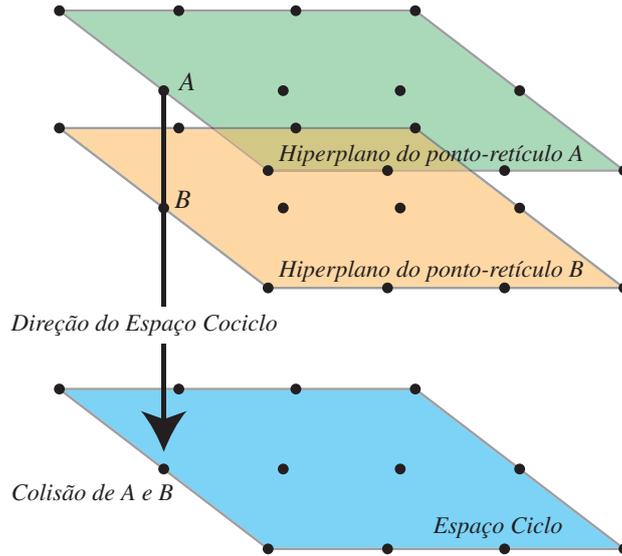


Figura 4.24: Colisão na representação baricêntrica a partir do grafo haltere.

Definição 4.4.4. *Duas redes periódicas são ditas **isomegúéticas** se possuem a mesma representação baricêntrica [32].*

Como o objetivo deste trabalho é mostrar que redes NC sempre apresentam colisões em suas representações baricêtricas, na próxima seção serão analisados exemplos onde é explicitado o procedimento para obtenção de tais representações.

4.5 Matrizes

O procedimento para a obtenção da representação baricêntrica de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) baseia-se em dois cálculos matriciais: um primeiro para mudança de base, e um segundo onde os cociclos são mapeados em zero. Serão introduzidos agora alguns conceitos e em seguida exemplos serão considerados.

Seja $[\alpha(C_i)]$ a *matriz voltagem* $m \times p$ associada à sua base ciclo-cociclo: as primeiras $m - n + 1$ linhas de $[\alpha(C_i)]$ fornecem as voltagens dos ciclos na base ciclo de N/\mathcal{T} , e as restantes $n - 1$ linhas, que fornecem a projeção da base cociclo, são o vetor zero para uma representação baricêntrica. Se \mathbf{K} é a matriz $m \times m$ cujas linhas fornecem a expressão dos vetores-base dos espaços ciclo e cociclo com relação aos vetores-aresta, também chamada de *matriz ciclo-cociclo*, então $(C_i) = \mathbf{K}(e_i)$, ou $(e_i) = \mathbf{K}^{-1}(C_i)$ e as arestas de N/\mathcal{T} são levadas na representação baricêntrica [4] para as linhas da matriz

$$(\rho(e_i)) = \mathbf{K}^{-1}[\alpha(C_i)]. \quad (4.1)$$

Será considerado novamente o $K_2^{(3)}$ num exemplo. Desta vez, suponha as voltagens das arestas e_1 , e_2 e e_3 respectivamente 10, 00 e 01. Por definição, a matriz

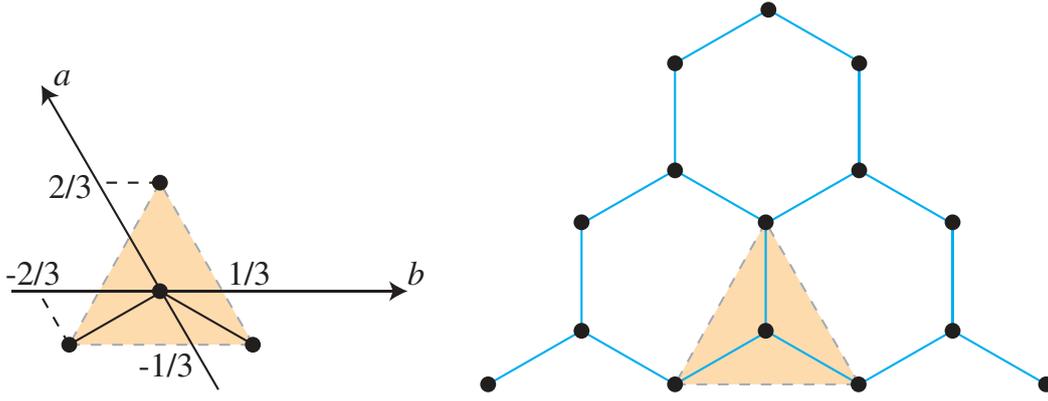


Figura 4.25: Coordenadas baricêntricas e representação baricêntrica da rede hexagonal.

ciclo-cociclo obedece à seguinte equação matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 - e_2 \\ e_2 - e_3 \\ e_1 + e_2 + e_3 \end{pmatrix}$$

Como o que se quer é descobrir as coordenadas dos vetores $\rho(e_1)$, $\rho(e_2)$ e $\rho(e_3)$ na representação baricêntrica, deve-se forçar que os vetores ciclo projetem as voltagens do grafo quociente, e que os cociclos projetem zero. Isto é, assim como foi visto na equação, $(\rho(e_i)) = \mathbf{K}^{-1}[\alpha(C_i)]$:

$$\rho \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -2/3 & 1/3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Isto implica que:

$$\rho \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 \\ -1/3 & 1/3 \\ -1/3 & -2/3 \end{pmatrix}$$

Então, como se vê na Figura 4.25, as coordenadas dos vetores $\rho(e_1)$, $\rho(e_2)$ e $\rho(e_3)$ são, respectivamente, $(2/3, 1/3)$, $(-2/3, 1/3)$ e $(-1/3, -2/3)$.

Serão analisados mais dois exemplos, desta vez 1-periódicos; em ambos serão obtidas redes lineares como representações baricêntricas.

Exemplo 4.5.1. Considere a rede 1-periódica representada na parte superior da Figura 4.26. O espaço ciclo tem dimensão 2, e é gerado pelos dois laços e_1 e e_2 do grafo quociente. O espaço cociclo tem dimensão 1, e é gerado pela aresta e_3 . Desta forma, a matriz ciclo-cociclo é a identidade I_3 ; conseqüentemente é igual à sua inversa.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Assim:

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

O resultado então é que $e_1 = 1$, $e_2 = 1$ e $e_3 = 0$ na representação baricêntrica. Isto implica que as arestas verticais da representação da Figura 4.26 colapsam, e os pontos A_i e B_i colidem, para todo $i \in \mathbb{Z}$. Assim, a representação baricêntrica do grafo 1-periódico apresenta colisões, e é o grafo linear.

Analogamente pode-se analisar o grafo 1-periódico da parte inferior da Figura 4.26. O número ciclomático é 4, e com isso pode-se utilizar os 4 ciclos independentes em destaque na figura como base do espaço ciclo. Como a dimensão do espaço aresta é 7, o espaço cociclo tem dimensão 3. Assim pode-se utilizar os 3 cociclos independentes também destacados na figura como base do espaço cociclo.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \bullet \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \\ e_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_4 + e_5 - e_6 \\ e_2 + e_3 + e_6 \\ e_3 + e_4 + e_7 \\ e_2 - e_5 - e_6 \\ e_5 + e_7 - e_4 \\ e_3 - e_7 - e_2 \end{pmatrix}$$

A inversa da matriz ciclo-cociclo está descrita abaixo, de onde pode-se calcular as coordenadas dos pontos na representação baricêntrica.

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \\ e_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/2 & -1/4 & 1/4 & 0 & -1/4 \\ 0 & 0 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 0 & 1/4 & -1/4 & -1/2 & 1/4 \\ 0 & 1/2 & 1/4 & -1/4 & -1/4 & 1/4 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/4 & 0 & -1/2 & -1/4 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & -1/4 & 1/2 & 0 & 1/4 & -1/4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Assim, tem-se:

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ e_4 \\ e_5 \\ e_6 \\ e_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Mais uma vez a representação baricêntrica é o grafo linear, pois $e_1 = 1$ e $e_i = 0$ para $i \in \{2, \dots, 7\}$; assim, há colisão dos pontos A_i, B_i, C_i e D_i , para $i \in \mathbb{Z}$.

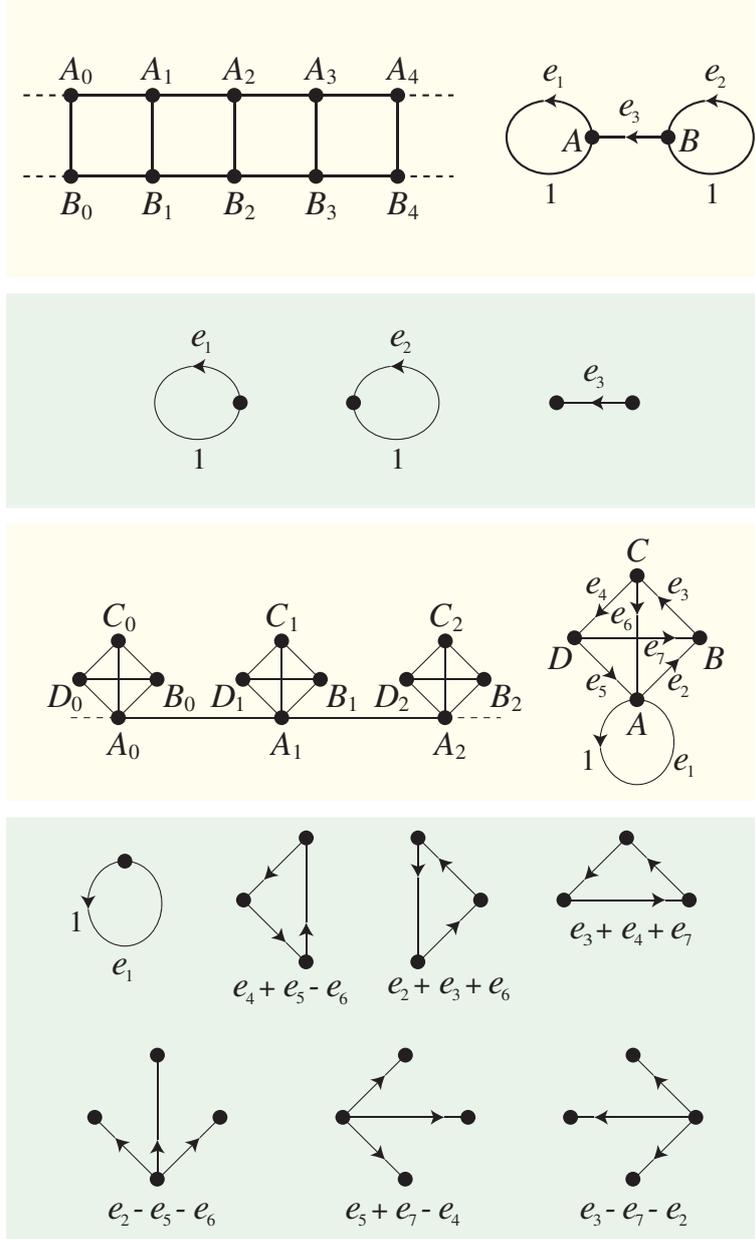


Figura 4.26: Em destaque amarelo, dois grafos 1-periódicos e seus quocientes. Em azul, elementos que formam bases para os espaços ciclo e cociclo, em cada caso: no primeiro, espaço ciclo com dimensão 2 e espaço cociclo com dimensão 1; no segundo, espaço ciclo com dimensão 4 e espaço cociclo com dimensão 3.

Parte II

Redes Não Cristalográficas

Capítulo 5

Introduzindo Redes Não Cristalográficas

Uma rede é cristalográfica se todos os seus automorfismos limitados são translações [20]. Este resultado indiretamente revela a mais fundamental propriedade de uma rede não cristalográfica: apresentar automorfismos limitados diferentes de translações. As luzes então se voltam para as perguntas: como se pode descrever um automorfismo limitado que não é uma translação? Como se pode descrever o grupo completo de automorfismos limitados de uma rede NC? Como podem ser construídas redes NC não triviais? Agora serão observados exemplos de redes NC, onde se podem destacar os automorfismos limitados diferentes de translações e colecionar outras propriedades importantes.

Primeiramente, observe a Figura 5.1a: uma grade 1-periódico e seu grafo quociente. Em destaque, pode-se observar o automorfismo (B_1, C_1) , que permuta os vértices B_1 e C_1 e deixa todos os demais fixos. É um automorfismo limitado, pois a distância entre B_1 e C_1 é limitada por 2, e não é translação. A existência deste automorfismo qualifica a grade como NC. Analogamente, podem ser criados grafos com periodicidade maior apresentando tais automorfismos, seguindo o mesmo raciocínio, como pode ser observado na parte (b) da mesma figura. É uma rede NC 2-periódica que apresenta o automorfismo limitado (B_{00}, C_{00}) que não é uma translação.

Identificar uma rede NC analisando somente seu grafo quociente, por outro lado, pode ser uma tarefa difícil. Observe os quocientes que estão na Figura 5.1. Veja que no quociente do grafo 1-periódico, o automorfismo (B, C) representa o automorfismo limitado que troca todos os vértices B_i com os respectivos C_i , $i \in \mathbb{Z}$. Neste caso, é fácil identificar que a rede derivada é NC, pois tal automorfismo no grafo quociente representa um automorfismo limitado da rede que não é translação. Nem sempre, porém, há representante para um automorfismo limitado que seja diferente de translação no grafo quociente. Neste mesmo exemplo não há representante para o automorfismo (A_1, B_1) do grafo 1-periódico, que troca apenas os vértices A_1 e

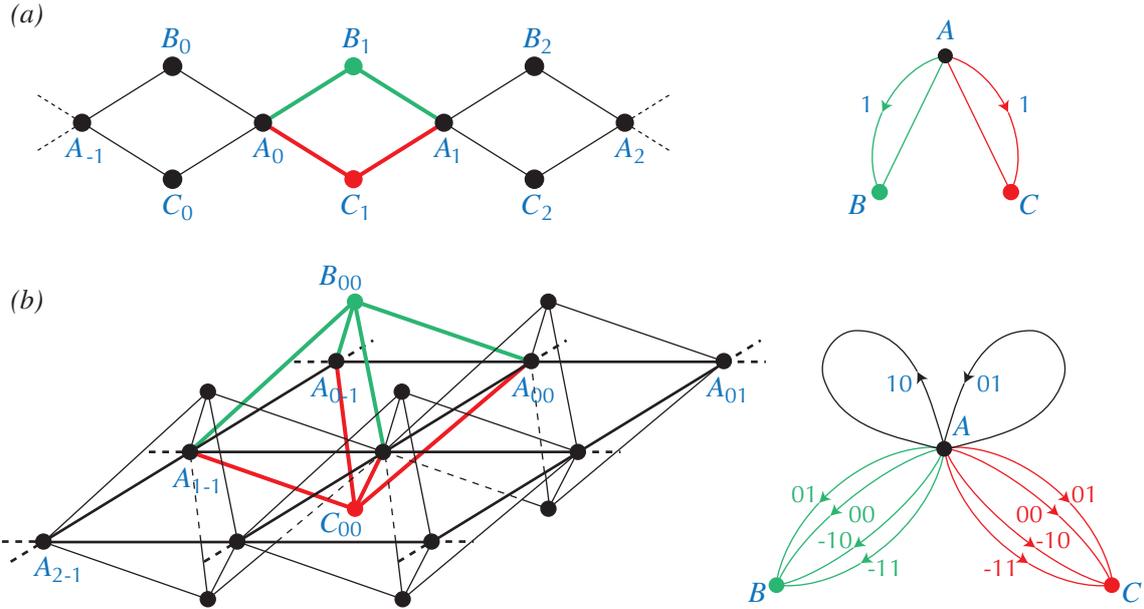


Figura 5.1: Exemplos de automorfismos limitados diferentes de translações em redes NC.

B_1 , deixando todos os demais fixos. A situação pode se complicar ainda mais: na Figura 5.2, há uma rede NC cujo quociente não fornece nenhuma informação similar sobre automorfismos limitados diferentes de translações, embora a rede derivada seja NC.

Muitas vezes, para que sejam alcançados resultados sobre redes NC via grafos quociente é essencial existir, para cada automorfismo α da rede, um automorfismo auxiliar representante no seu grafo quociente. Isto ocorre exatamente quando α **comuta** com todos os elementos do grupo de translação que origina o grafo quociente. A explicação para isto se dá pelo fato de um retículo do grafo quociente estar definido para subgrupos normais, ou seja, quando o retículo à direita e à esquerda se equivalem: $\alpha\mathcal{T} = \mathcal{T}\alpha$. A trama se complica quando α não comuta com \mathcal{T} . Para compreender este fato, seja (N, \mathcal{T}) uma rede periódica com grupo de translação \mathcal{T} , e seja \mathcal{B} o grupo de todos os automorfismos limitados da rede (obviamente, $\mathcal{T} < \mathcal{B}$). Em geral, um automorfismo limitado α de (N, \mathcal{T}) , não contido em \mathcal{T} , não respeita os vértice-retículos e aresta-retículos de (N, \mathcal{T}) . Isto implica que não é possível definir uma ação consistente, induzida por α , no grafo quociente N/\mathcal{T} . Por exemplo, será revisitado o grafo 1-periódico que foi observado no início do texto na Figura 5.3. Na situação (a), suponha $\alpha_1 = (B_i, C_i)$, o automorfismo limitado que troca A_i com B_i , para todo $i \in \mathbb{Z}$. Neste caso, α_1 comuta com o grupo de translações. Na figura, supondo $t = (X_i, X_{i+3})$, observe que $t\alpha_1 = \alpha_1 t$. Já na situação (b), supondo $\alpha_2 = (B_1, C_1)$ (o automorfismo limitado que troca apenas A_1 com B_1 , fixando todo o resto), o que ocorre é $t\alpha_2 \neq \alpha_2 t$. Em (a), há um representante de α_1 no grafo quociente da rede, e na Figura 5.3 corresponde ao automorfismo (B, C) do grafo

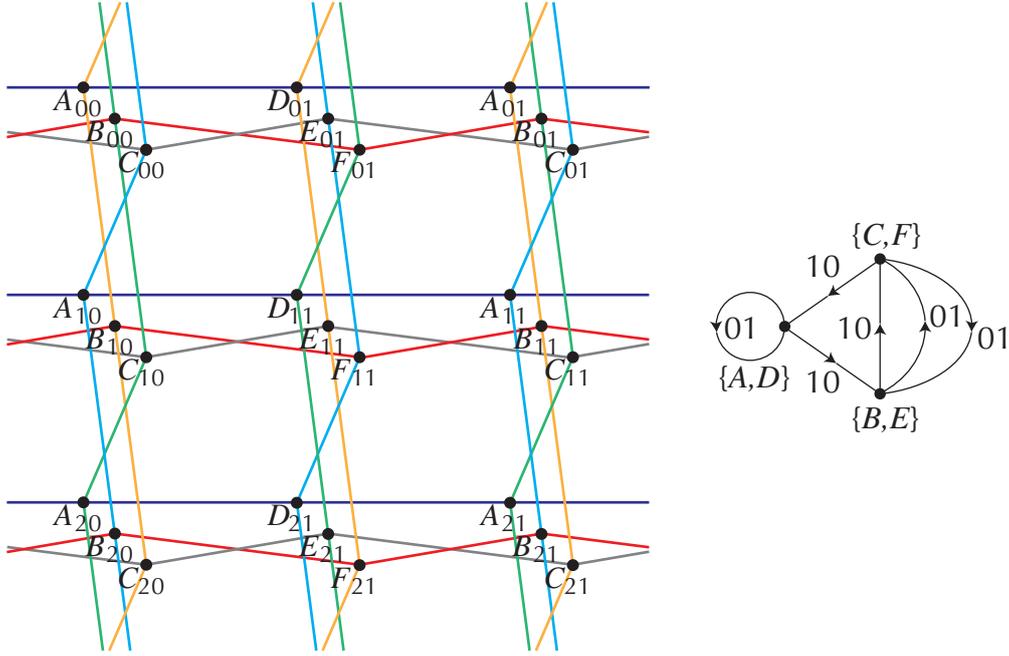


Figura 5.2: Uma rede NC cujo grafo quociente não apresenta automorfismos não triviais que preservam a voltagem de ciclos.

quociente. Em (b), não há representante de α_2 no grafo quociente.

Isto só acontece porque há automorfismos limitados em \mathcal{B} que não comutam com todos os elementos de \mathcal{T} . Pode-se contornar esta dificuldade trabalhando-se com um subgrupo especial \mathcal{S} de \mathcal{T} que comuta com α : \mathcal{S} deve então pertencer ao centro de \mathcal{B} . Será mostrado no Capítulo 6 que tal subgrupo de \mathcal{T} de fato existe se \mathcal{B} atua livremente sobre a rede, e tem índice finito em \mathcal{T} , o que é importante para gerar um grafo quociente N/\mathcal{S} finito.

Uma característica ainda mais importante das redes NC é a existência de blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados, que serão peças fundamentais do Capítulo 7 e do Capítulo 8. Como já foi introduzido no capítulo inicial, uma partição do conjunto de vértices em subconjuntos, chamados blocos, é dita um sistema de imprimitividade para o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} se \mathcal{B} preserva a partição, isto é, se qualquer $f \in \mathcal{B}$ leva um bloco Δ num bloco $f(\Delta)$. A Figura 5.4 destaca a existência de blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados em vários exemplos de redes NC. Em (a) são considerados vários grafos 1-periódicos. Em (b), os blocos da rede 2-periódica são os conjuntos $\{B_{ij}, C_{ij}\}$ e os conjuntos unitários $\{A_{ij}\}$, para todo $i, j \in \mathbb{Z}$. Em (c), os blocos são os conjuntos $\{A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}\}$ e $\{D_{ij}, E_{ij}, F_{ij}\}$, para todo $i, j \in \mathbb{Z}$. Na verdade, redes NC sempre admitem partição do conjunto de vértices em blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados. O objetivo deste trabalho é mostrar que representações baricêntricas de redes NC apresentam sempre colisões. Mas isto será alcançado em dois passos: primeiro, mostrando (Capítulo 7) que as representações baricêntricas

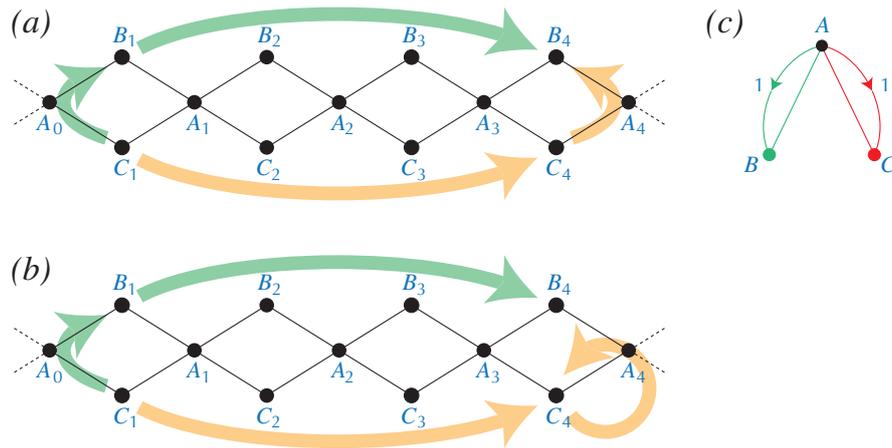


Figura 5.3: Em (a), o automorfismo limitado $\alpha_1 = (B_i, C_i)$ comuta com o grupo de translações. Assim, possui o correspondente (B, C) no grafo quociente. Em (b), o automorfismo local $\alpha_2 = (B_1, C_1)$ claramente não comuta com o grupo de translações. Em (c), o grafo quociente.

das redes que admitem blocos finitos de imprimitividade sempre apresentam colisões de vértices, e em seguida (Capítulo 8) mostrando que toda rede NC admite sempre partição do conjunto de vértices em blocos finitos de imprimitividade.

Se (N, \mathcal{T}) é uma rede periódica, um sistema de imprimitividade para \mathcal{K} é dito *periódico* se $\mathcal{T} < \mathcal{K}$.

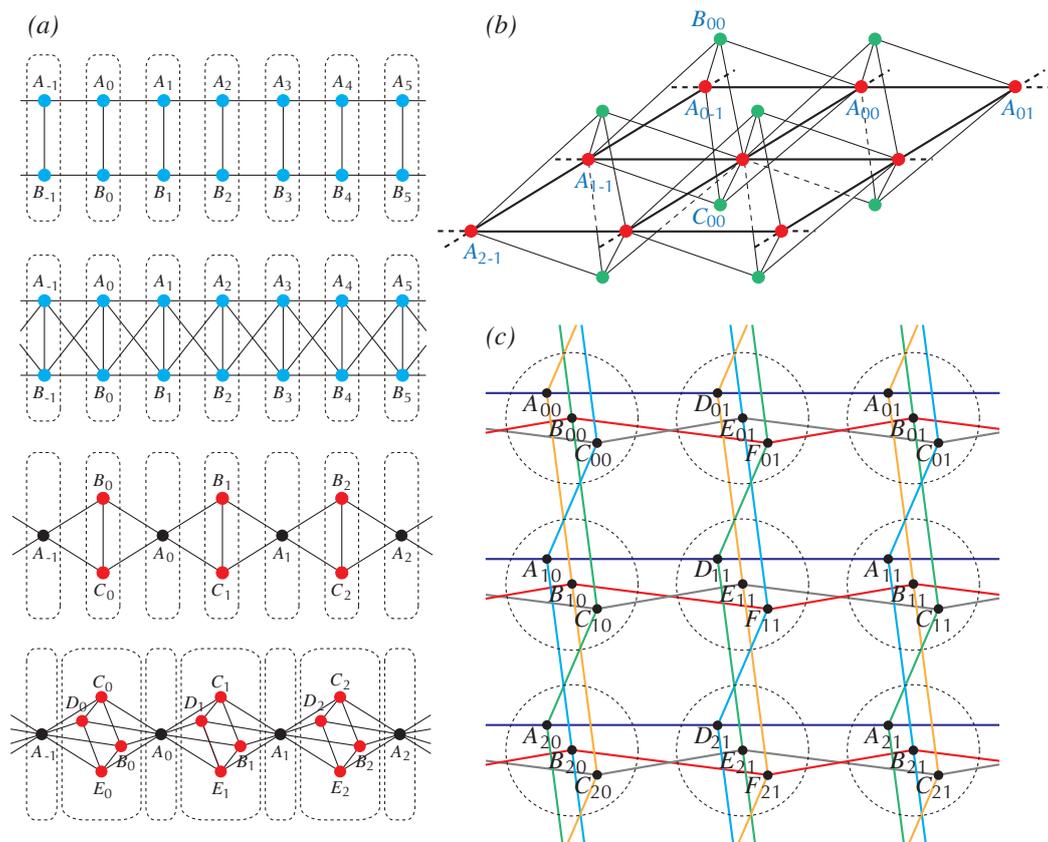


Figura 5.4: Grafos 1-periódicos que admitem blocos finitos de imprimitividade para automorfismos limitados. Os blocos aparecem destaque.

Capítulo 6

Redes NC com grupos de automorfismos limitados não abelianos que atuam livremente

Este capítulo foca na classe especial de **redes NC com grupo de automorfismos limitados não abeliano que atua livremente**. O objetivo deste capítulo é mostrar que qualquer representação baricêntrica de uma tal rede NC apresenta colisão de vértices (Seção 6.1). Este é um dos grandes resultados do artigo já publicado em **Non-crystallographic nets with freely acting, non-abelian local automorphism groups** [7]. Um método geral é apresentado para derivar tais redes a partir de redes cristalográficas e alguns exemplos são explorados. Os grupos de automorfismos limitados de tais redes são descritos como o produto subdireto de grupos de permutação por grupos de translações (Seção 6.2). Mostra-se que o grafo de voltagem de tais redes não necessariamente apresenta automorfismos não triviais que permutam ciclos de mesma voltagem. Um método direto para geração de tais redes é apresentado (Seção 6.3).

6.1 Principais Resultados

Como foi visto no capítulo anterior, pode-se contornar a dificuldade de não haver representantes em N/\mathcal{T} de um automorfismo α da rede ao se trabalhar com um subgrupo especial \mathcal{S} de \mathcal{T} que comuta com α : \mathcal{S} deve então pertencer ao centro de \mathcal{B} . Será mostrado nesta seção que este subgrupo de \mathcal{T} existe, e tem índice finito em \mathcal{T} , o que torna N/\mathcal{S} um grafo finito.

Lema 6.1.1. *Seja α um automorfismo limitado de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) e seja t uma translação de \mathcal{T} . Então existe uma translação em $\langle t \rangle$ que comuta com α .*

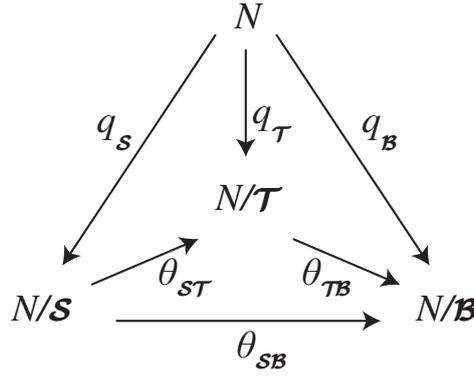


Figura 6.1: Uma rede periódica N , seus diferentes grafos quociente e suas projeções.

Demonstração. Denote por $|\alpha|$ a distância máxima em N entre um vértice e sua imagem por α , automorfismo limitado. Considere um vértice arbitrário V de N e o conjunto de imagens $\{V_n = t^{-n}\alpha t^n(V) : n \in \mathbb{N}\}$. Como t^n é um automorfismo (preserva distâncias), então $d\{V, V_n\} = d\{t^n(V), t^n(V_n)\}$. Mas $t^n(V_n) = t^n(t^{-n}\alpha t^n(V)) = \alpha t^n(V)$. Com isso, tem-se que $d\{V, V_n\} = d\{t^n(V), \alpha t^n(V)\} \leq |\alpha|$. Assim, para todo n , tem-se V_n contido na bola de centro V e raio $|\alpha|$. Como a rede é localmente finita, existe um número finito de vértices nesta bola, e $V_m = V_n$ para pelo menos dois inteiros diferentes m e n . Isto implica $t^{-m}\alpha t^m(V) = t^{-n}\alpha t^n(V)$. Fazendo $p = m - n > 0$ e multiplicando à esquerda por t^m , obtém-se $\alpha t^m(V) = t^p\alpha t^n(V)$. Definindo $W = t^n(V)$, conclui-se então que $\alpha t^p(W) = t^p\alpha(W)$; isto implica $(t^p\alpha)^{-1}\alpha t^p(W) = W$, e como o único automorfismo limitado com um vértice fixo é a identidade, conclui-se que $(t^p\alpha)^{-1}\alpha t^p = e$, o que implica que $t^p\alpha = \alpha t^p$. \square

Veja um exemplo simples da aplicação deste lema, onde se busca a descrição de um subgrupo $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ de elementos que comutam com todos os elementos do grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} :

Exemplo 6.1.1. *Seja (N, \mathcal{T}) uma rede periódica em que o grupo de translações \mathcal{T} é gerado por t_1, t_2 , e o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} é gerado pelos elementos α, β, γ . Pelo Lema 6.1.1, sabe-se que existem $p, q, r \in \mathbb{N}$ tais que $t_1^p\alpha = \alpha t_1^p$, $t_1^q\beta = \beta t_1^q$ e $t_1^r\gamma = \gamma t_1^r$. Analogamente, existem $x, y, z \in \mathbb{N}$ tais que $t_2^x\alpha = \alpha t_2^x$, $t_2^y\beta = \beta t_2^y$ e $t_2^z\gamma = \gamma t_2^z$. Então pode-se concluir que o subgrupo $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ gerado por $t_1^{\text{mmc}\{p,q,r\}}$ e $t_2^{\text{mmc}\{x,y,z\}}$ comuta com todos os elementos de \mathcal{B} .*

Observe, no entanto, que a construção de \mathcal{S} foi possível devido ao fato de o grupo dos automorfismos limitados ser finitamente gerado. Felizmente este é o caso para a classe de redes com grupo de automorfismos limitados não abeliano que atua livremente, e é o que se demonstra no próximo teorema.

Teorema 6.1.1. *Se o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) atua livremente na rede, então \mathcal{B} é finitamente gerado e seu centro contém um subgrupo $\mathcal{S} \leq \mathcal{T}$ de índice finito em \mathcal{T} .*

Demonstração. Como \mathcal{B} e \mathcal{T} atuam livremente na rede, é possível definir os grafos quociente $G_{\mathcal{T}} = N/\mathcal{T}$ e $G_{\mathcal{B}} = N/\mathcal{B}$, bem como suas funções quociente respectivas $q_{\mathcal{T}}$ e $q_{\mathcal{B}}$ (veja Figura 6.1). Veja que $G_{\mathcal{B}}$ é finito, uma vez que $\mathcal{T} \leq \mathcal{B}$. Sejam λ e τ as atribuições de voltagem para $G_{\mathcal{B}}$ e $G_{\mathcal{T}}$ em \mathcal{B} e \mathcal{T} respectivamente, de modo que os grafos derivados $G_{\mathcal{B}}^{\lambda}$ e $G_{\mathcal{T}}^{\tau}$ são isomorfos a N . Que \mathcal{B} é finitamente gerado é imediato, já que N é conexa e as voltagens de $G_{\mathcal{B}}$ formam um conjunto de geradores. Como \mathcal{B} e \mathcal{T} são finitamente gerados, pode-se aplicar o lema anterior a todo par de geradores $(\alpha, t) \in \mathcal{B} \times \mathcal{T}$ e conseqüentemente encontrar um subgrupo $\mathcal{S} \leq \mathcal{T}$ de índice finito em \mathcal{T} que comuta com qualquer automorfismo limitado de N , e com isso pertence ao centro de \mathcal{B} . \square

Note que N/\mathcal{S} é um grafo finito, pois \mathcal{S} tem índice finito em \mathcal{T} . Como \mathcal{S} é um subgrupo de \mathcal{T} , deve-se considerar daqui em diante que N/\mathcal{S} possui voltagens em \mathcal{T} . A Figura 6.1 desdobra todo o conjunto de relações entre a rede e seus três quocientes, ou seja, a projeção regular $q_{\mathcal{S}}$ da rede para o seu quociente N/\mathcal{S} e as projeções $\theta_{\mathcal{T}\mathcal{B}}$, $\theta_{\mathcal{S}\mathcal{B}}$ e $\theta_{\mathcal{S}\mathcal{T}}$. Por exemplo, define-se $\theta_{\mathcal{T}\mathcal{B}}$, a projeção de $G_{\mathcal{T}}$ a $G_{\mathcal{B}}$, por $\theta_{\mathcal{T}\mathcal{B}}[q_{\mathcal{T}}(x)] = q_{\mathcal{B}}(x)$, para $x \in N$. Com estas definições, o diagrama mostrado na Figura 6.1 é comutativo.

Agora pode-se demonstrar o resultado que foi antecipado no início deste capítulo.

Corolário 6.1.1. *Se o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) é não abeliano e atua livremente na rede, então a representação baricêntrica da rede possui colisões de vértices.*

Demonstração. De acordo com [5], um automorfismo limitado $\varphi \in \mathcal{B}$ é um *automorfismo periódico* da rede periódica (N, \mathcal{S}) se comuta com qualquer translação de \mathcal{S} . Assim, seguindo o Corolário 9 desta referência, φ atua como uma translação na representação baricêntrica de (N, \mathcal{S}) . Mas claramente, para uma origem e uma base fixadas, (N, \mathcal{S}) e (N, \mathcal{T}) admitem a mesma representação baricêntrica [4]. Se \mathcal{B} é não abeliano, podem ser encontrados dois automorfismos limitados φ e ψ e um vértice U na rede tais que $\varphi\psi(U) \neq \psi\varphi(U)$. Entretanto, φ e ψ atuam como translações (comutando) na representação baricêntrica da rede, de modo que os dois vértices $\varphi\psi(U)$ e $\psi\varphi(U)$ são representados pelo mesmo ponto Euclideano. Em outras palavras, a representação baricêntrica da rede apresenta colisões de vértices. \square

Assim é garantida a existência de colisões no caso em que uma rede periódica admite um grupo de automorfismos limitados não abeliano que atua livremente.

6.2 Geração de redes NC

Esta seção descreve um procedimento para a geração de redes não cristalográficas com grupos de automorfismos não abelianos que atuam livremente. A principal ideia é a construção do grafo de voltagem N/\mathcal{S} que foi definido na última seção. Uma vez que qualquer automorfismo $\varphi \in \mathcal{B}$ comuta com \mathcal{S} , ele preserva vértice-retículos e aresta-retículos por \mathcal{S} , bem como relações de incidência entre os mesmos; consequentemente ele induz um automorfismo de N/\mathcal{S} .

Como φ é automorfismo limitado de N , o automorfismo induzido de N/\mathcal{S} leva ciclos em ciclos de mesma voltagem [20]. O grupo \mathcal{H} destes automorfismos deve também atuar livremente em N/\mathcal{S} e ser não abeliano. É claro a partir da Figura 6.1 que o quociente de N/\mathcal{S} por \mathcal{H} é isomorfo ao quociente N/\mathcal{B} . Isto significa que pode-se derivar N/\mathcal{S} a partir de N/\mathcal{B} através de uma atribuição de voltagem em \mathcal{H} . Então o procedimento começa com um grafo finito P ao qual atribuem-se como voltagens os elementos de um conjunto de geradores de um grupo finito não abeliano \mathcal{H} . Sabe-se então que \mathcal{H} atua livremente no grafo derivado D [28]. Resta agora atribuir as voltagens em \mathbb{Z}^n a D de maneira que ciclos que estão na mesma órbita por \mathcal{H} possuam a mesma voltagem. Uma rede periódica N é então derivada, e ela admite um grupo de automorfismos limitados não trivial \mathcal{B} .

A próxima subseção detalha cada passo da construção aplicada a um exemplo simples. São apresentados alguns detalhes das propriedades da rede e de seu grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} . Será determinado seu grupo de translação maximal \mathcal{T} , bem como o correspondente grafo de voltagem N/\mathcal{T} . O quociente N/\mathcal{B} será encontrado, e ele será descrito como grafo de voltagem com atribuições em \mathcal{B} , além de ser analisada a sua relação com a representação baricêntrica da rede.

6.2.1 B_2 com voltagens (1,2) e (1,2,3) em \mathcal{S}_3

O caso mais simples possível vai ser considerado, quando o grafo base P é o buquê B_2 , cujos laços possuem como voltagens a transposição (1, 2) e a permutação cíclica (1, 2, 3), tomados como geradores de \mathcal{S}_3 (o grupo de permutações de três elementos no conjunto $\{1, 2, 3\}$). Para simplificação, utiliza-se 12 e 123 ao invés da notação cíclica completa (1, 2) e (1, 2, 3), respectivamente.

O grafo base e seu grafo derivado D são mostrados na parte (a) da Figura 6.2, onde os rótulos dos vértices e das arestas de D foram obtidos de acordo com o que foi visto na Capítulo 4, segundo o procedimento base-derivado. O grupo de voltagem tem ordem seis e o grafo base contém um vértice e duas arestas; consequentemente o grafo derivado contém $6 \times 1 = 6$ vértices e $6 \times 2 = 12$ arestas [28]. Assim como no grafo base, cada vértice U_p do grafo derivado é a origem de duas arestas a_p e b_p para $p \in \mathcal{S}_3$ (e o vértice final de duas arestas). Por exemplo, a aresta a_{12} vai do

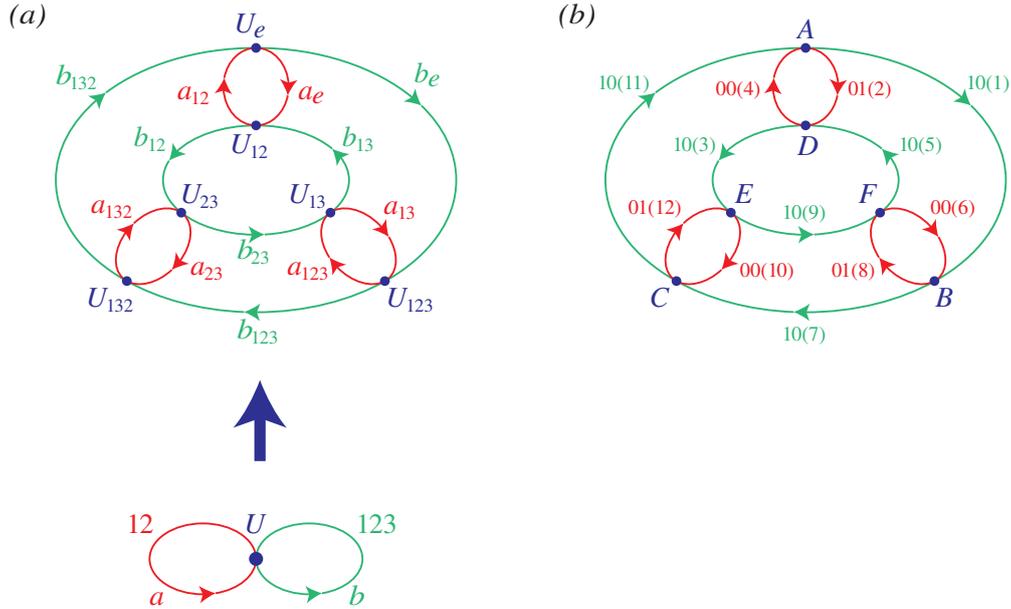


Figura 6.2: Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2 . Os rótulos das arestas são dados entre parênteses.

vértice U_{12} até o vértice $U_{12.12} = U_e$ e a aresta b_{12} vai do vértice U_{12} até o vértice $U_{12.123} = U_{23}$ (permutações num produto são aplicadas da direita para a esquerda).

Sabe-se que o grupo de voltagem \mathcal{S}_3 atua livremente no grafo derivado D [28]. Para evitar confusão, será chamado de \mathcal{H} o subgrupo de $\text{Aut}(D)$ que é isomorfo a \mathcal{S}_3 . Denota-se por ϕ_p o automorfismo de D em correspondência com $p \in \mathcal{S}_3$. A ação dos dois geradores ϕ_{12} e ϕ_{123} de \mathcal{H} é dada pelas seguintes permutações dos elementos x_p (vértices ou arestas) de D :

$$\begin{aligned}\phi_{12} &= (x_e, x_{12})(x_{13}, x_{132})(x_{123}, x_{23}), \\ \phi_{123} &= (x_e, x_{123}, x_{132})(x_{13}, x_{23}, x_{12}).\end{aligned}$$

(É importante lembrar-se da ação à esquerda da voltagem que foi vista durante o Capítulo 4. Por exemplo: $\phi_{12}(x_{13}) = x_{12.13} = x_{132}$.)

Agora procuram-se possíveis voltagens em D de maneira a gerar, utilizando-se D como grafo base, uma rede periódica derivada N . Estas voltagens são escolhidas num grupo de translação de uma tal maneira que todo automorfismo de \mathcal{H} envia ciclos em ciclos de mesma voltagem. Como D possui número ciclomático 7, podem ser escolhidos 7 ciclos independentes para uma base do espaço ciclo, conforme destacados em cores na Figura 6.3, os três 2-ciclos (vermelhos), o 3-ciclo interno (verde) e os três 4-ciclos (azul, preto e amarelo), todos com orientação no sentido horário. Pode-se acompanhar o efeito da ação dos geradores ϕ_{12} e ϕ_{123} sobre os ciclos citados com a Figura 6.4. É claro que os três 2-ciclos são equivalentes por \mathcal{H} e assim devem possuir a mesma voltagem, o que também acontece no caso dos três 4-ciclos. Os

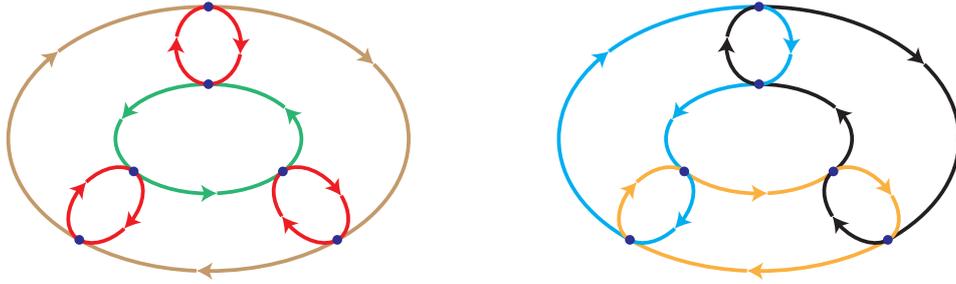


Figura 6.3: Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.

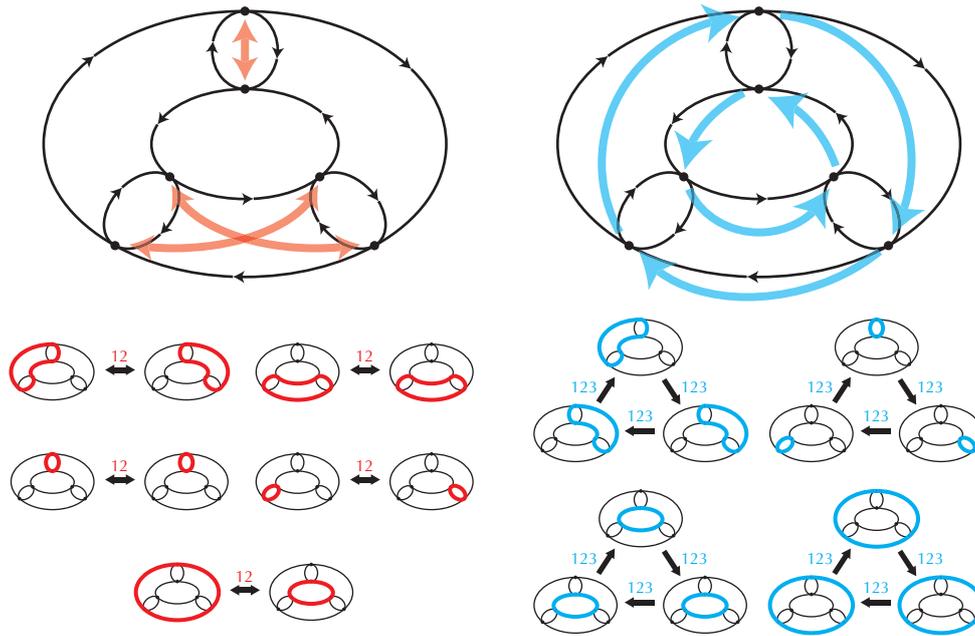


Figura 6.4: Algumas imagens de ciclos por ações de ϕ_{12} e ϕ_{123} . Estes exemplos já foram vistos na Figura 4.15.

3-ciclos internos e externos são também trocados por ϕ_{12} , mas com a inversão de sua orientação. Será chamada de $\alpha(C_n)$ a voltagem sobre o n -ciclo ($n = 2, 3, 4$) na base do espaço ciclo; a voltagem sobre o 3-ciclo externo deve ser então $-\alpha(C_3)$. Por outro lado, o 3-ciclo externo é a soma de todos os ciclos da base, o que fornece a seguinte relação entre as voltagens:

$$3\alpha(C_2) + 3\alpha(C_4) + \alpha(C_3) = -\alpha(C_3).$$

Devido à existência desta relação, a periodicidade da rede derivada será no máximo 2. Esta equação pode ser parametrizada como

$$\begin{cases} \alpha(C_3) & = -3t \\ \alpha(C_2) + \alpha(C_4) & = 2t \end{cases}$$

Uma possível atribuição de voltagem, correspondendo a $t = 10$ e $\alpha(C_2) = 01$, é

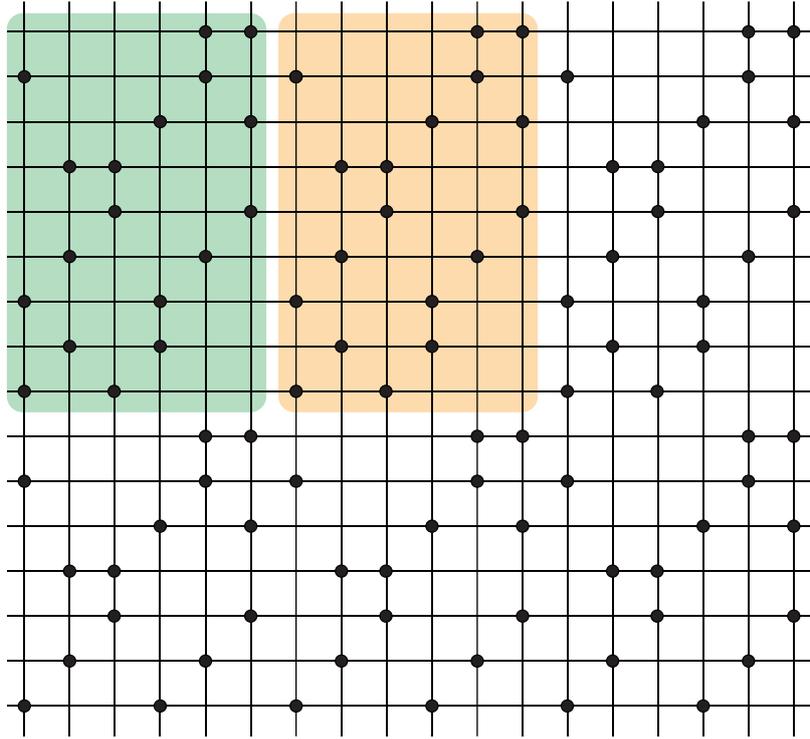


Figura 6.5: Uma representação da rede N derivada de D . Esta representação é muito confusa, uma melhor representação está na Figura 6.6.

mostrada na parte (b) da Figura 6.2. Na realidade, qualquer outra atribuição tal que $\alpha(C_2)$ e $\alpha(C_4)$ são linearmente independentes gera uma rede 2-periódica isomorfa.

Devido ao grande número de cruzamentos de arestas, representações de redes NC podem ser muito confusas. Veja na Figura 6.5 uma representação da rede 2-periódica N derivada de D , onde sequer se consegue enxergar a periodicidade. Mas pode-se construir a representação de N que é vista na Figura 6.6, que foi desenhada como uma distorção de uma representação baricêntrica da rede; pode-se chamar de *pseudo-baricêntrica* tal representação. Nela, alguns vértices são separados em blocos por círculos. Usando para as arestas os rótulos que são vistos na parte (b) da Figura 6.2, sete ciclos foram escolhidos para formar a base do espaço ciclo: $(1,8,5,4)$, $(2,3,10,11)$, $(2,4)$, $(6,8)$, $(10,12)$, $(3,9,5)$ e $(1,7,11)$. Cinco cociclos foram escolhidos para formar a base do espaço cociclo: $(1,2,-4,-11)$, $(7,8,-1,-6)$, $(11,12,-7,-10)$, $(3,4,-2,-5)$ and $(5,6,-8,-9)$. As matrizes associadas à base ciclo-cociclo K , e as linhas em qualquer representação baricêntrica são respectivamente (a notação $\bar{1}$ significa -1):

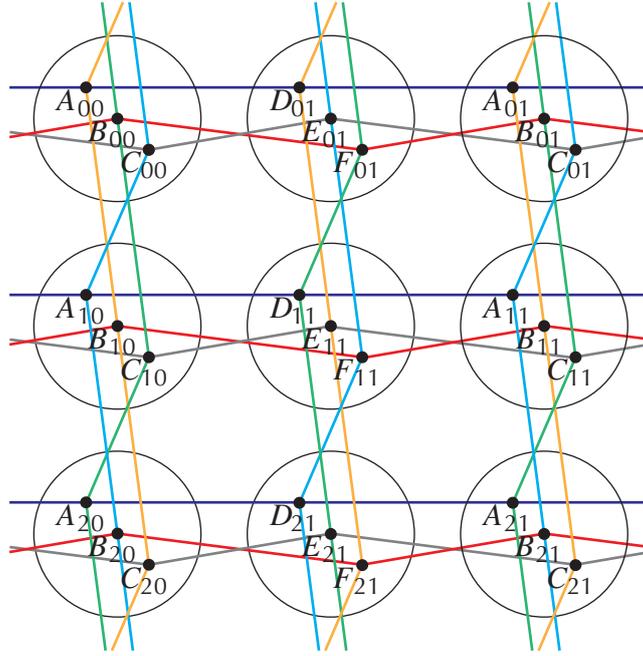


Figura 6.6: Uma representação da rede NC derivada do grafo de tensão dado na Figura 6.2. Os vértices que colidem nas representações baricêntricas foram segregados no interior de círculos negros e formam duas classes: $\{A, B, C\}$ e $\{D, E, F\}$.

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & \bar{1} & 1 & 1 \\ 0 & \bar{1} & 1 & 1 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\rho(e_i)) = \mathbf{K}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 0 \\ 3 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{pmatrix}$$

Como era esperado, as doze arestas do grafo quociente D são representadas por apenas dois vetores no \mathbb{R}^2 : as arestas com rótulos ímpares, pré-imagens da aresta b do grafo base P , são representadas por $(1, 0)$ e as arestas com rótulos pares, pré-imagens da aresta a de P , são representadas por $(0, 1/2)$.

A representação de algumas arestas da rede como vetores do subgrafo fundamental implica a ocorrência de colisões. Por exemplo, o vértice A_{ij} é ligado ao $B_{i+1,j}$ por uma aresta representada pelo vetor 10 , o que significa que os pontos representativos satisfazem a $\rho(B_{i+1,j}) = \rho(A_{ij}) + (10) = \rho(A_{i+1,j})$. Esta observação se estende a todo par de vértices ligados por arestas que pertencem à pré-imagem da aresta b no grafo base P , de onde se obtém uma colisão de todos os vértices na rede por triplas:

$$\begin{cases} \rho(A_{ij}) = \rho(B_{ij}) = \rho(C_{ij}) = \rho(A_{00}) + (i, j) = (i, j) \\ \rho(D_{ij}) = \rho(E_{ij}) = \rho(F_{ij}) = \rho(D_{00}) + (i, j) = (i, j - 1/2) \end{cases}$$

Observe que a representação baricêntrica da rede é a mesma da rede quadrada. Isto pode ser visto na Figura 6.6 depois de colapsar os três vértices que estão no interior de cada círculo negro em vértices únicos e substituir as múltiplas arestas geradas por arestas simples.

Busca-se agora uma descrição completa do grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} da rede. A primeira motivação é checar se \mathcal{B} atua livremente sobre a rede, de modo a validar a construção. Mas também é importante determinar um subgrupo de translação maximal $\mathcal{T} > \mathcal{S}$ e analisar os automorfismos do respectivo grafo quociente N/\mathcal{T} .

Por construção, sabe-se que \mathcal{H} atua livremente e vértice-transitivamente sobre N/\mathcal{S} . Como \mathcal{H} também preserva as voltagens sobre os ciclos de N/\mathcal{S} , pode-se derivar ao menos um automorfismo levando o vértice A_{00} a um vértice arbitrário X_{ij} ($X = A, B, \dots, F$) da rede e respeitando os vértice-retículos por \mathcal{S} .

Observe agora que entre todos os ciclos em N/\mathcal{S} , os 2-ciclos com voltagem 01 e os 3-ciclos com voltagem 30 possuem o menor comprimento reduzido. Consequentemente, suas pré-imagens em N são geodésicas fortes. Através de qualquer vértice da rede passa exatamente uma geodésica forte paralela a 10 e exatamente uma paralela a 01. Mais ainda, a rede inteira está conectada através destas geodésicas: cada aresta de N pertence a uma geodésica das duas famílias. Tais propriedades permitiram representar as duas famílias de geodésicas por retas verticais e horizontais desenhadas com cores diferentes de maneira a distinguir as que se cruzam. Como automorfismos limitados levam geodésicas fortes em geodésicas fortes paralelas (veja em [29]), segue então que existe um único automorfismo levando A_{00} em X_{ij} , $X \in \{A, B, C, D, E, F\}$, e com isso \mathcal{B} atua livremente sobre N .

Sejam α e β os automorfismos limitados levantados de ϕ_{12} e ϕ_{123} que enviam A_{00} a seus primeiros vizinhos D_{01} e B_{10} , respectivamente. Com a ajuda da Figura 6.6, a definição dos dois automorfismos pode ser completada como se segue:

$$\alpha : \begin{cases} A_{ij} \rightarrow D_{i,j+1} \rightarrow A_{i,j+1} \\ B_{ij} \rightarrow F_{i,j+1} \rightarrow B_{i,j+1} \\ C_{ij} \rightarrow E_{i,j+1} \rightarrow C_{i,j+1} \end{cases}$$

$$\beta : \begin{cases} A_{ij} \rightarrow B_{i+1,j} \rightarrow C_{i+2,j} \rightarrow A_{i+3,j} \\ D_{ij} \rightarrow F_{i+1,j} \rightarrow E_{i+2,j} \rightarrow D_{i+3,j} \end{cases}$$

Os resultados anteriores mostraram que \mathcal{B} atua livremente e vértice-transitivamente sobre a rede. Consequentemente, o grafo quociente N/\mathcal{B} é bem definido e isomorfo ao buquê B_2 . Obviamente, α e β devem ser escolhidos como voltagens em N/\mathcal{B} dos laços a e b , respectivamente (veja a Figura 6.2). Como consequência, α e β são dois geradores de \mathcal{B} . Vale a pena notar que os dois automorfismos α e β atuam como translações ao longo de 01 e 10, respectivamente, sobre a representação baricêntrica da rede (Figura 6.6).

O fato de que todo automorfismo em \mathcal{B} está unicamente associado com (i) um automorfismo em \mathcal{H} e (ii) uma translação da representação baricêntrica sugere inserir \mathcal{B} no produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ usando a seguinte correspondência:

$$\begin{cases} A_{ij} \rightarrow (e; (i, 2j)) \\ B_{ij} \rightarrow (123; (i, 2j)) \\ C_{ij} \rightarrow (132; (i, 2j)) \\ D_{ij} \rightarrow (12; (i, 2j - 1)) \\ E_{ij} \rightarrow (23; (i, 2j - 1)) \\ F_{ij} \rightarrow (13; (i, 2j - 1)) \end{cases}$$

Ao lado esquerdo, os vértices X_{ij} ($X = A, B, \dots, F$) em N foram rotulados como

derivados de N/\mathcal{S} com voltagens em \mathbb{Z}^2 . Ao lado direito aparece o par $(p; t) \in \mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$, onde $\phi_p \in \mathcal{H}$ leva A em X e $t \in \mathbb{Z}^2$ é a translação que leva $\rho(A_{00})$ em $\rho(X_{ij})$ na representação baricêntrica. Obtém-se a desejada inserção observando que cada vértice da rede pode ser derivado diretamente de B_2 com voltagens em \mathcal{B} , e rotulado U_φ com índice simples $\varphi \in \mathcal{B}$, o que é dado à esquerda da correspondência. Em particular, o grupo de translação \mathcal{S} de N é o subgrupo $\{(e; (i, 2j)) : (i, j) \in \mathbb{Z}^2\}$. Como de costume, a operação de grupo em $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ é definida por

$$(p_1; t_1)(p_2; t_2) = (p_1 p_2; t_1 + t_2).$$

o que é consistente com a ação de \mathcal{B} sobre a rede dada por $\varphi_1 U_{\varphi_2} = U_{\varphi_1 \varphi_2}$ (as duas componentes p e t de $\varphi = (p, t)$ atuam separadamente sobre N/\mathcal{S} e sobre a representação baricêntrica de N , respectivamente). O grupo \mathcal{B} é claramente um subgrupo não trivial de $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$. Ele é na verdade o produto subdireto (ver Seção 2.3) de \mathcal{S}_3 e \mathbb{Z}^2 . Os dois geradores de \mathcal{B} podem ser identificados como

$$\alpha = (12; (0, 1)); \quad \beta = (123; (1, 0)).$$

Agora buscam-se extensões maximais de \mathcal{S} , ou seja, grupos de translação maximais da rede. É fácil ver que α estende \mathcal{S} , levando a um subgrupo abeliano livre \mathcal{T} de \mathcal{B} . Adicionando a \mathcal{S} qualquer outro automorfismo com uma transposição 12, 13 ou 23 como primeira coordenada também funcionaria. Por outro lado, permutações cíclicas de ordem 3 não podem ser utilizadas. Adiciona-se, por exemplo, $[123; (i, 2j)]$ a \mathcal{S} ; assim, a extensão também conteria $[123; (0, 0)]$, que verifica $\varphi^3 = e$, e com isso não é um grupo livre (ver Definição 2.1.23). Isto significa que \mathcal{T} não pode ser estendido por outro automorfismo com uma transposição 13 ou 23 na primeira coordenada, já que também conteria a permutação 123 como primeira coordenada. Então, há exatamente três extensões isomórficas maximais de \mathcal{S} .

A Figura 6.7 mostra o grafo quociente N/\mathcal{T} , que é obtido de N/\mathcal{S} da seguinte forma: determina-se a classe de vértices equivalentes por ϕ_{12} . Por exemplo, nesta figura, B e E são equivalentes por ϕ_{12} . As classes das arestas orientadas são obtidas similarmente. Isto cria uma projeção natural q_{12} de N/\mathcal{S} em N/\mathcal{T} , ainda sem voltagens. As voltagens das arestas de N/\mathcal{T} são obtidas a partir das voltagens de N/\mathcal{S} de tal forma que a voltagem de um ciclo de N/\mathcal{T} é k sempre que a voltagem da pré-imagem deste ciclo em \mathcal{S} for k . Isto pode ser facilmente alcançado partindo-se de uma árvore geradora do grafo orientado das classes de vértices e arestas por ϕ_{12} . Cada aresta r adicionada a esta árvore cria um ciclo α_r de N/\mathcal{T} , e a voltagem desta aresta deve ser a voltagem da pré-imagem de α_r em N/\mathcal{S} via q_{12} .

Antes de deixar esta subseção, salienta-se que embora a rede derivada não seja cristalográfica, não há automorfismos não triviais de N/\mathcal{T} que preserva a voltagem

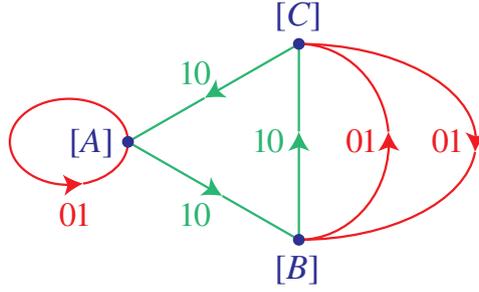


Figura 6.7: O quociente N/\mathcal{T} da rede representada na Figura 6.6, com vértice-órbitas $[A] = \{A, D\}$, $[B] = \{B, E\}$ e $[C] = \{C, F\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade do mesmo em \mathcal{S} , na mesma direção. Vetores de translações ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.

dos ciclos.

6.2.2 B_2 com voltagens (1,2) e (1,3) em \mathcal{S}_3

Suponha agora que o grafo base seja o grafo B_2 com voltagens 12 e 13. O grafo derivado D está descrito na parte (a) da Figura 6.8.

Usando as mesmas notações da seção anterior, a ação dos dois geradores ϕ_{12} e ϕ_{13} de \mathcal{H} é dada pelas seguintes permutações dos elementos x_p (vértices ou arestas) de D .

$$\phi_{12} = (x_e, x_{12})(x_{13}, x_{132})(x_{123}, x_{23}),$$

$$\phi_{13} = (x_e, x_{13})(x_{12}, x_{123})(x_{132}, x_{23}).$$

Argumentando como acima, pode-se observar que há uma única rede 2-dimensional, a menos de isomorfismo, admitindo D como seu grafo quociente e tal que a ação de ϕ_{12} e ϕ_{13} envia ciclos em ciclos de mesma voltagem (as imagens de alguns ciclos podem ser vistas na Figura 6.9). O grafo de voltagem correspondente é mostrado na parte (b) da Figura 6.8 e a rede derivada na Figura 6.10.

Novamente como no exemplo anterior, buscam-se possíveis voltagens em D de maneira a gerar uma rede periódica derivada N . Como D possui número ciclomático 7, são escolhidos 7 ciclos independentes para uma base do espaço ciclo, conforme destacados em cores na Figura 6.11: os seis 2-ciclos (verdes e vermelhos) e o 6-ciclo interno (amarelo), todos com orientação no sentido horário. Pode-se acompanhar o efeito da ação dos geradores ϕ_{12} e ϕ_{123} sobre os ciclos citados com a Figura 6.9. É claro que os três 2-ciclos verdes são equivalentes por \mathcal{H} , e que os três 2-ciclos vermelhos também são equivalentes por \mathcal{H} ; devem, então, possuir a mesma voltagem. Os 6-ciclos internos e externos são também trocados por \mathcal{H} , mas com a inversão de sua orientação. Será chamada de $\alpha(C_R)$ a voltagem sobre um 2-ciclo vermelho, de

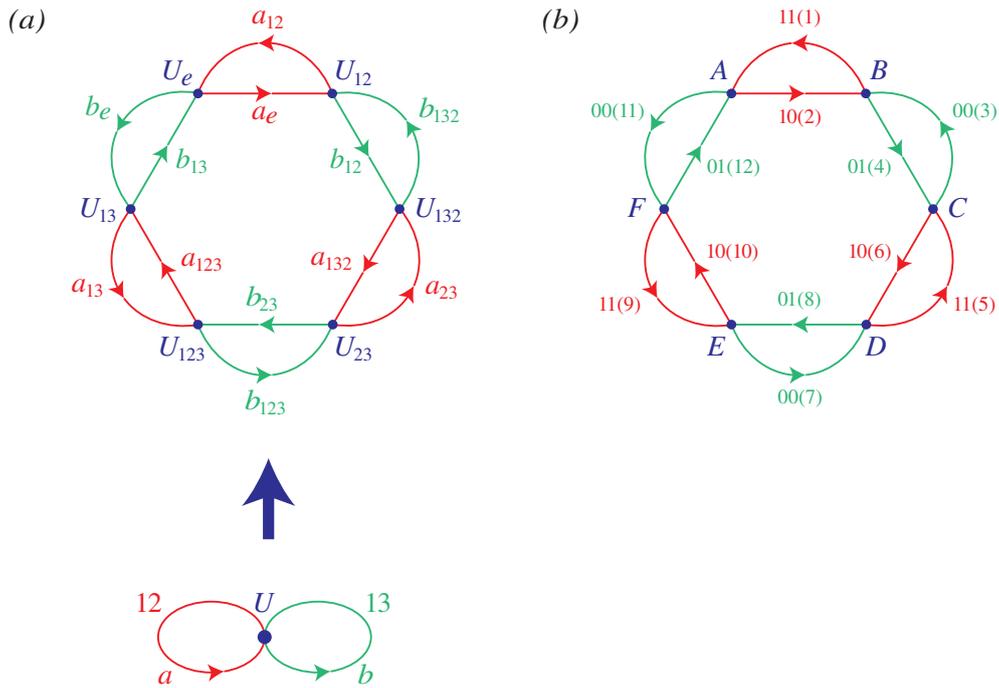


Figura 6.8: Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2 . Os rótulos das arestas são dados em parênteses.

$\alpha(C_G)$ a voltagem sobre um 2-ciclo verde, e C_I a voltagem sobre o 6-ciclo interno; a voltagem sobre o 6-ciclo externo deve ser então $-\alpha(C_I)$. O 6-ciclo externo é a soma de todos os ciclos da base, o que fornece a seguinte relação entre as voltagens:

$$3\alpha(C_R) + 3\alpha(C_G) + \alpha(C_I) = -\alpha(C_I).$$

A periodicidade da rede derivada será no máximo 2. Esta equação pode ser parametrizada como

$$\begin{cases} \alpha(C_I) & = -3t \\ \alpha(C_V) + \alpha(C_G) & = 2t \end{cases}$$

Uma possível atribuição de voltagem, correspondendo a $t = 11$ e $\alpha(C_G) = 01$, é mostrada na parte (b) da Figura 6.8. Novamente, pode-se verificar que as doze arestas de N/S são representadas por apenas dois vetores na representação baricêntrica: as arestas 1, 2, 5, 6, 9, 10 por $(1, 1/2)$ e as arestas 3, 4, 7, 8, 11, 12 por $(0, 1/2)$ (veja a Figura 6.8 para identificar os rótulos das arestas). Resulta que os três vértice-retículos A, C e E colidem, bem como os três vértice-retículos B, D e F . De novo, a representação baricêntrica da rede N é a mesma da rede quadrada, como se pode ver na Figura 6.10 depois de colidir os vértices que estão no interior dos círculos negros.

As diferentes coordenadas são como se segue:

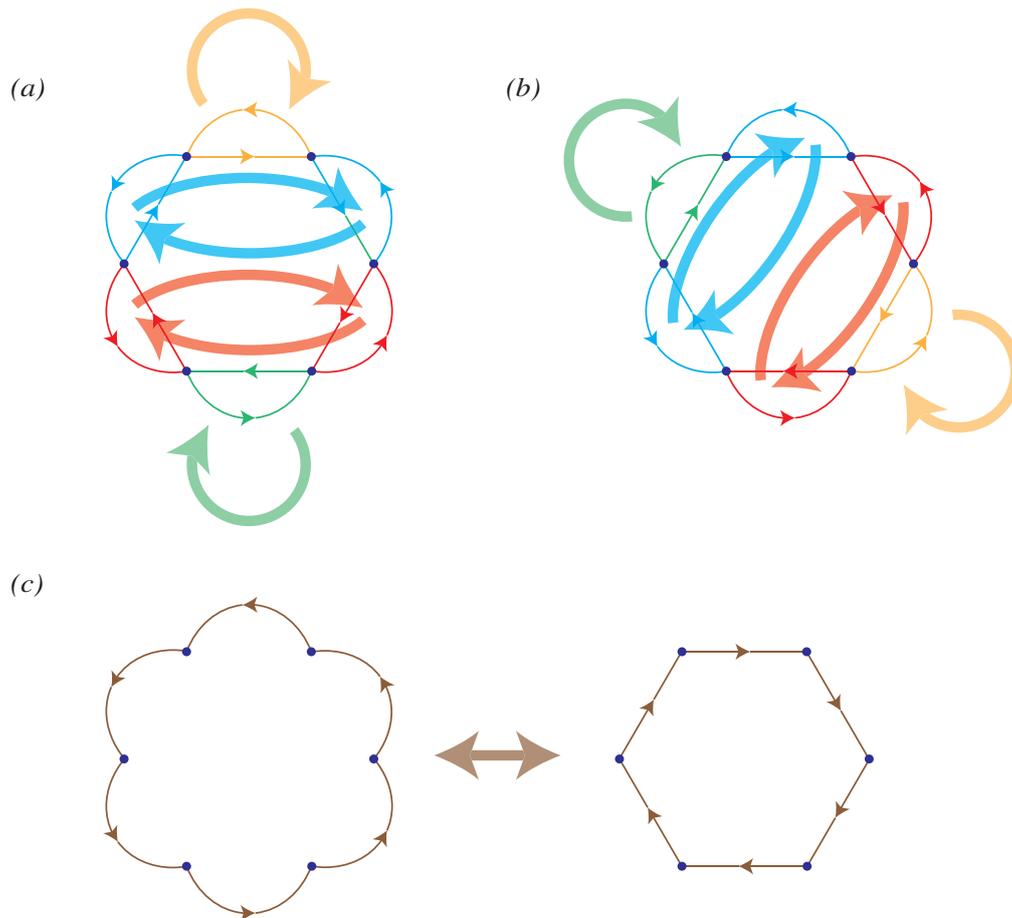


Figura 6.9: Imagens de ciclos pela ação de 12 em (a) e pela ação de 13 em (b). Em (c) vê-se que a imagem do ciclo externo é o ciclo interno, e vice-versa, tanto pela ação de 12 quanto pela ação de 13.

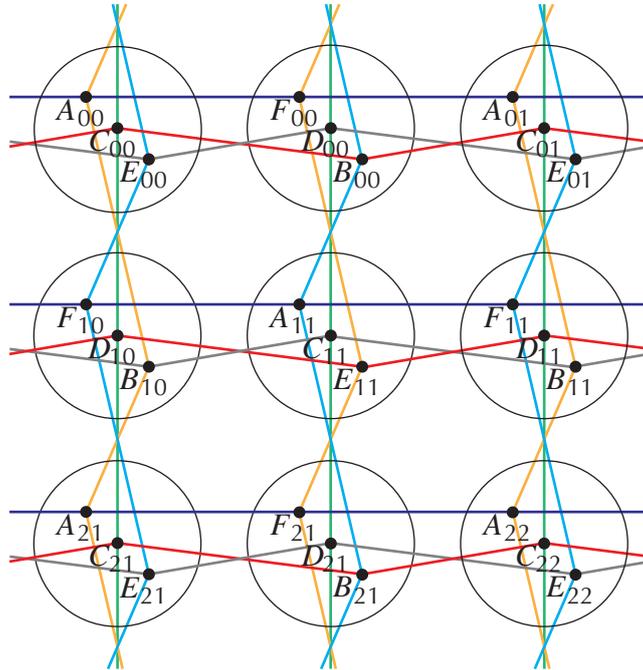


Figura 6.10: Uma representação pseudo-baricêntrica da rede NC derivada do grafo de tensão dado na Figura 6.8. Os vértices que colidem nas representações baricêntricas da rede foram segregados no interior de círculos negros e formam duas classes: $\{A, C, E\}$ e $\{B, D, F\}$.

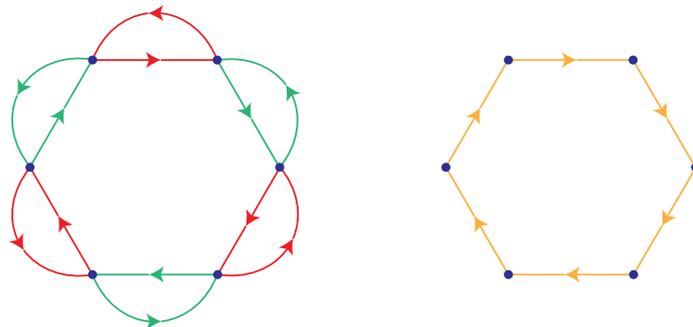


Figura 6.11: Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.

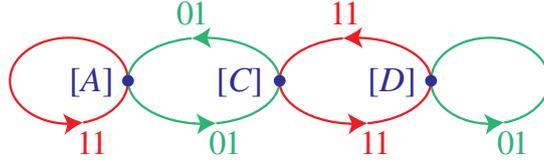


Figura 6.12: O quociente N/\mathcal{T} , com vértice-órbitas $[A] = \{A, B\}$, $[C] = \{C, F\}$ e $[D] = \{D, E\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade do mesmo em \mathcal{S} , na mesma direção. Vetores de translações ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.

$$\begin{cases} \rho(A_{ij}) = \rho(C_{ij}) = \rho(E_{ij}) = \rho(A_{00}) + (i, j) = (i, j) \\ \rho(B_{ij}) = \rho(D_{ij}) = \rho(F_{ij}) = \rho(F_{00}) + (i, j) = (i, j + 1/2) \end{cases}$$

A pré-imagem de qualquer 2-ciclo do grafo quociente N/\mathcal{S} é novamente uma geodésica forte e, como acima, pode-se ver que o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} atua livremente e transitivamente sobre a rede. Assim, o grafo quociente N/\mathcal{B} é mais uma vez isomorfo ao buquê B_2 e apenas dois geradores são necessários. Também se pode inserir \mathcal{B} no produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ com a seguinte correspondência:

$$\begin{cases} A_{ij} \rightarrow (e; (i, 2j)) \\ B_{ij} \rightarrow (12; (i, 2j + 1)) \\ C_{ij} \rightarrow (132; (i, 2j)) \\ D_{ij} \rightarrow (23; (i, 2j + 1)) \\ E_{ij} \rightarrow (123; (i, 2j)) \\ F_{ij} \rightarrow (13; (i, 2j + 1)) \end{cases}$$

Os dois geradores de \mathcal{B} podem agora ser identificados como:

$$\alpha = (12; (1, 1)); \quad \beta = (13; (0, 1)).$$

O grupo de translação \mathcal{S} de N é o mesmo subgrupo $\{(e; (i, 2j)) : (i, j) \in \mathbb{Z}^2\}$. Novamente, três extensões isomórficas de \mathcal{S} são possíveis ao se adicionar qualquer automorfismo com uma transposição como primeira coordenada. O grafo quociente é mostrado na Figura 6.12, onde fica evidente que não há automorfismos que preservam as voltagens de ciclos em N/\mathcal{T} .

As duas redes representadas nas Figura 6.6 e Figura 6.10 parecem ter tantas similaridades que é legítimo perguntar se são isomorfas. Elas não são, como mostra a análise de pares ligados de geodésicas fortes. Considere duas geodésicas paralelas -A-B-C- e -D-E-F- na primeira rede, desenhadas como retas amarelas na Figura 6.6. Elas são ligadas apenas pelas arestas AD, ou seja: o subgrafo induzido (infinito) é uma escada como dois vértices de grau 2 entre dois degraus. Não há tal subgrafo na segunda rede, onde cada par de geodésicas fortes ligadas mostra um vértice de grau

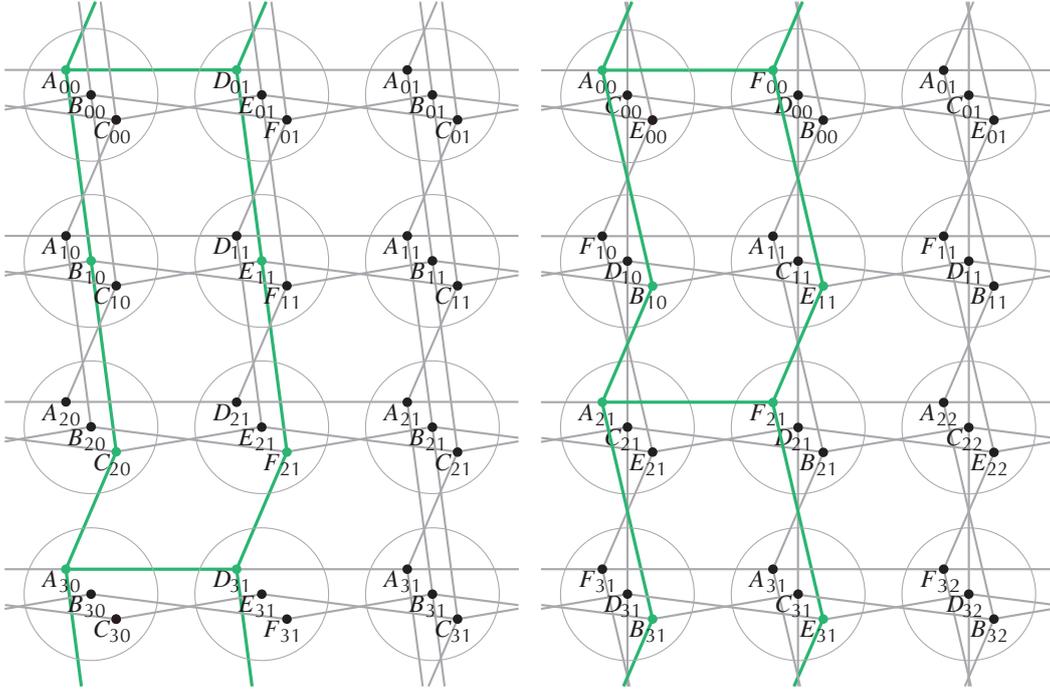


Figura 6.13: Duas redes NC não isomorfas. Observe que o subgrafo infinito verde destacado de uma não existe na outra.

2 alternando com um degrau. Note que o argumento direto sobre a rede é preferível, em detrimento do argumento baseado nos grafos quociente, uma vez que a escada na primeira rede se projeta no subgrafo do grafo quociente na Figura 6.2 contendo os dois 3-ciclos e a aresta AD com rótulo 4. Pares ligados de geodésicas na segunda rede se projetam em 2-ciclos ligados por uma única aresta.

6.2.3 $K_2^{(3)}$ com voltagens e, (1,2) e (1,3) em \mathcal{S}_3

O buquê com dois laços é um caso muito particular. Menos trivial é o exemplo do grafo $K_2^{(3)}$ com voltagens 12 e 13 em \mathcal{S}_3 . O grafo derivado D é mostrado na parte (a) da Figura 6.14; na parte (b), uma escolha de atribuição de voltagem.

A ação dos dois geradores ϕ_{12} e ϕ_{13} de \mathcal{H} , assim como na seção anterior, é dada pelas seguintes permutações dos elementos x_p (vértices ou arestas) de D .

$$\phi_{12} = (x_e, x_{12})(x_{13}, x_{132})(x_{123}, x_{23}),$$

$$\phi_{13} = (x_e, x_{13})(x_{12}, x_{123})(x_{132}, x_{23}).$$

Há uma única rede 2-dimensional, a menos de isomorfismo, admitindo D como seu grafo quociente e tal que a ação de ϕ_{12} e ϕ_{13} envia ciclos em ciclos de mesma voltagem (as imagens de alguns ciclos podem ser vistas na Figura 6.15).

Como D possui número ciclomático 7, são escolhidos 7 ciclos independentes para uma base do espaço ciclo, conforme destacados em cores na Figura 6.11, os seis

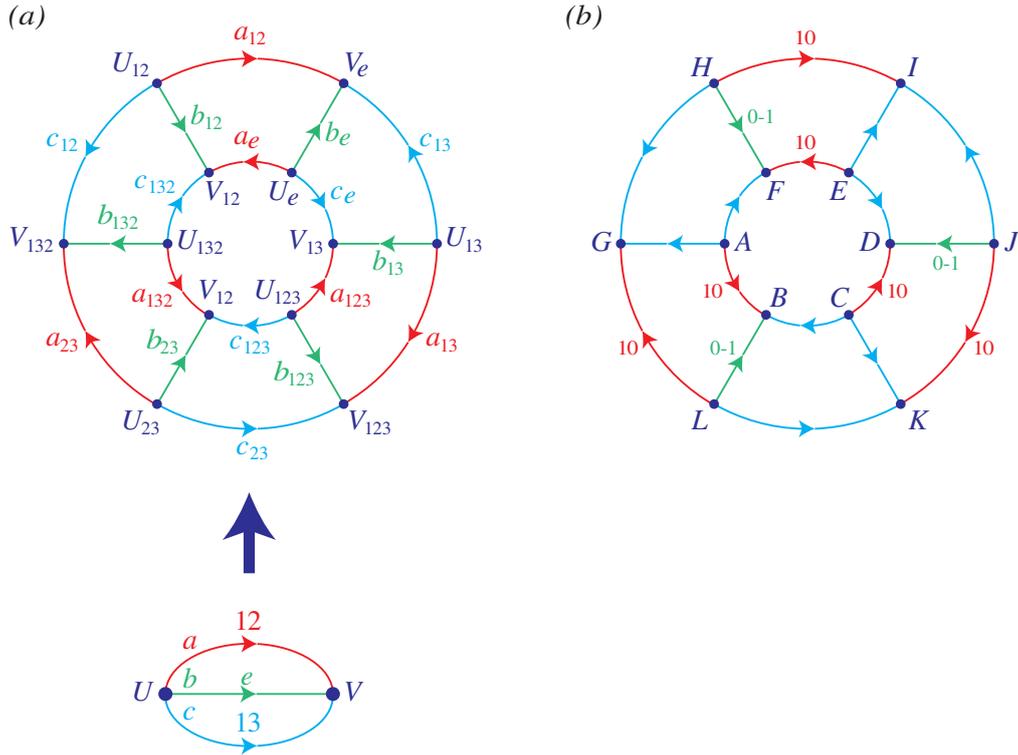


Figura 6.14: Em (a), o grafo base P e o grafo derivado D . Em (b), o grafo D com voltagens em \mathbb{Z}^2 .

4-ciclos (azuis e vermelhos) e o 6-ciclo interno (amarelo), todos com orientação no sentido horário. Pode-se acompanhar o efeito da ação dos geradores ϕ_{12} e ϕ_{13} sobre tais ciclos com a Figura 6.15. Os três 4-ciclos azuis são equivalentes por \mathcal{H} , e os três 4-ciclos vermelhos também são equivalentes por \mathcal{H} , e então possuem a mesma voltagem. Os 6-ciclos internos e externos são também trocados por \mathcal{H} , mas com a inversão de sua orientação. Será chamada de $\alpha(C_R)$ a voltagem sobre um 4-ciclo vermelho, de $\alpha(C_G)$ a voltagem sobre um 4-ciclo azul, e C_I a voltagem sobre o 6-ciclo interno; a voltagem sobre o 6-ciclo externo deve ser então $-\alpha(C_I)$. O 6-ciclo externo é a soma de todos os ciclos da base, o que fornece a seguinte relação entre as voltagens:

$$3\alpha(C_R) + 3\alpha(C_A) + \alpha(C_I) = -\alpha(C_I).$$

A periodicidade da rede derivada será no máximo 2. Esta equação pode ser parametrizada como

$$\begin{cases} \alpha(C_I) & = -3t \\ \alpha(C_V) + \alpha(C_A) & = 2t \end{cases}$$

Uma possível atribuição de voltagem, correspondendo a $t = 11$ e $\alpha(C_B) = 01$, é mostrada na parte (b) da Figura 6.14.

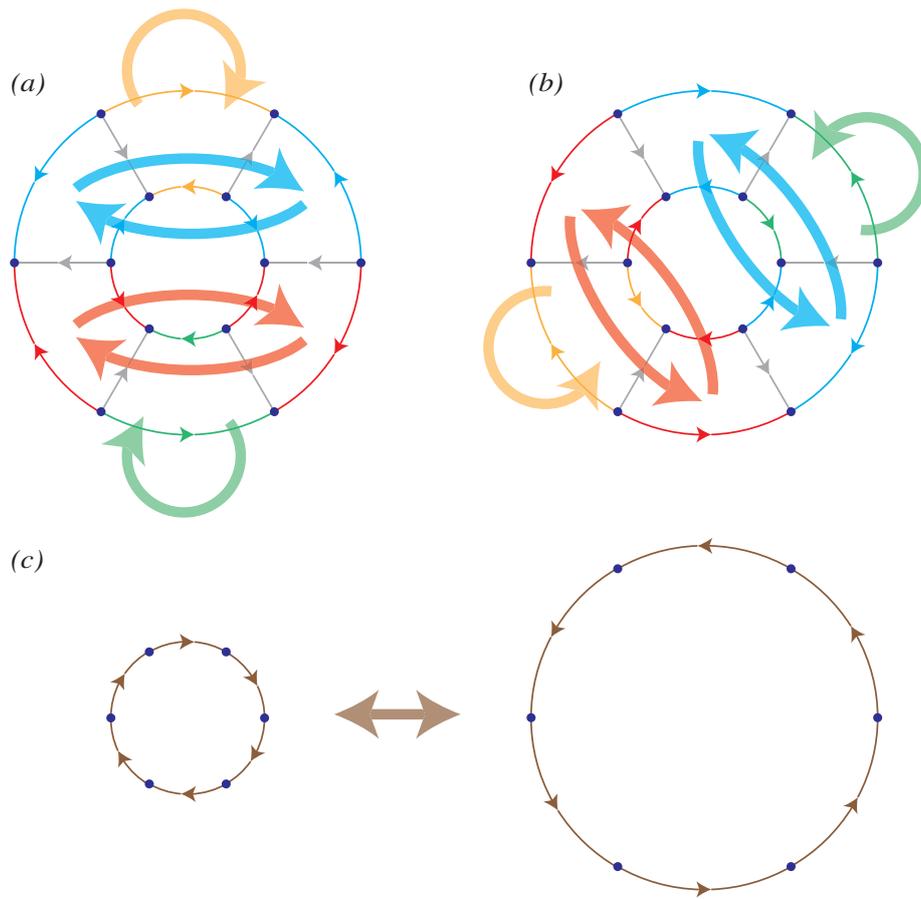


Figura 6.15: Imagens de ciclos pela ação de 12 em (a) e pela ação de 13 em (b). Em (c) pode-se ver que a imagem do ciclo externo é o ciclo interno, e vice-versa, tanto pela ação de 12 quanto pela ação de 13.

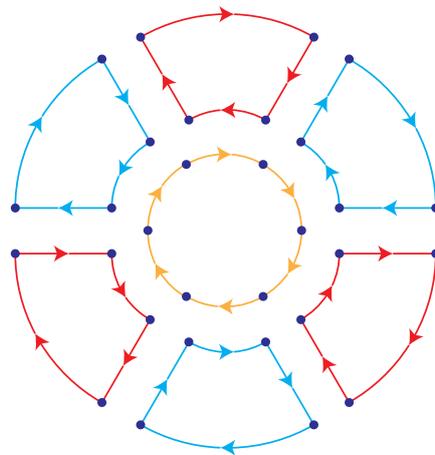


Figura 6.16: Os 7 ciclos independentes que serão utilizados como base para o espaço ciclo.

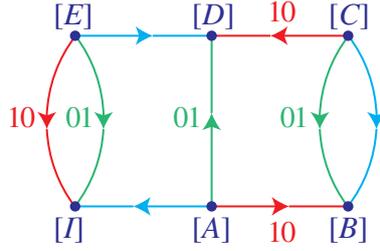


Figura 6.17: O quociente N/\mathcal{T} , com vértice órbitas $[A] = \{A, J\}$, $[B] = \{B, K\}$, $[C] = \{C, L\}$, $[D] = \{D, G\}$, $[E] = \{H, E\}$ e $[I] = \{I, F\}$. Note que o vetor translação ao longo de 01 em \mathcal{T} é a metade daquele de \mathcal{S} na mesma direção; os vetores translação ao longo de 10 são iguais em ambos os grupos.

A representação pseudo-baricêntrica da rede derivada é desenhada na Figura 6.18. A representação baricêntrica de N é a mesma da rede hexagonal, como era esperado. Pode-se inserir \mathcal{B} no produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ com a seguinte correspondência:

$$\begin{cases} A_{ij} \rightarrow (132; (i, 2j)) \\ C_{ij} \rightarrow (123; (i, 2j)) \\ E_{ij} \rightarrow (e; (i, 2j)) \\ H_{ij} \rightarrow (12; (i, 2j - 1)) \\ J_{ij} \rightarrow (13; (i, 2j - 1)) \\ L_{ij} \rightarrow (23; (i, 2j - 1)) \end{cases}$$

Os dois geradores de \mathcal{B} podem ser agora identificados como:

$$\alpha = (12; (1, 1)); \quad \beta = (13; (0, 1)).$$

O grupo de translação \mathcal{S} de N é o subgrupo $\{(e; (i, 2j)) : (i, j) \in \mathbb{Z}^2\}$. Novamente, três extensões isomórficas de \mathcal{S} são possíveis ao se adicionar qualquer automorfismo com uma transposição como primeira coordenada. O grafo de tensão é mostrado na Figura 6.17, onde se vê claramente que não há automorfismos que preservam a tensão dos ciclos em N/\mathcal{T} .

Curiosamente, a rede que pode ser derivada de $K_2^{(3)}$ com tensões 12, e e 123 em \mathcal{S}_3 é isomorfa à rede que acabou de ser descrita. De fato, o grafo derivado finito D já é isomorfo ao descrito na Figura 6.14, o que pode ser percebido a seguir. Serão utilizados os mesmos símbolos para os elementos de $K_2^{(3)}$ com ambas as atribuições de tensões, apenas adicionando apóstrofes para o grafo com tensões 12 e 123. Pode ser observado que a multiplicação à direita por 12 das tensões 12, e e 13 da primeira atribuição de tensões leva às tensões e , 12 e 123 da segunda atribuição, com troca de tensões das primeiras duas arestas. Isto sugere definir uma aplicação θ entre os respectivos grafos como a seguir:

$$\theta : \left\{ \begin{array}{l} U_p \mapsto U'_p \\ V_p \mapsto V'_{p,12} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} a_p \mapsto b'_p \\ b_p \mapsto a'_p \\ c_p \mapsto c'_p \end{array} \right.$$

É possível verificar que θ é um homomorfismo de grafos, o que fica evidente na Figura 6.19.

6.3 Geração direta de redes não cristalográficas

O procedimento usado acima para a indexação dos elementos do grupo \mathcal{B} de automorfismos limitados que atua livremente pode ser estendido para a geração direta de redes NC n -periódicas. Suponha que ϕ seja um automorfismo de \mathcal{B} levando o vértice A_0 , escolhido como origem, ao vértice B_s ; ϕ pode ser escrito como $(p, t) \in \mathcal{H} \times \mathbb{Z}^n$, onde p é a permutação de \mathcal{H} levando o vértice A ao vértice B em N/\mathcal{S} , e t é a translação levando $\rho(A_0)$ a $\rho(B_s)$ na representação baricêntrica da rede. Veja a Figura 6.20. Imediatamente é possível verificar que a aplicação $\phi \mapsto (p, t)$ é um monomorfismo (homomorfismo injetivo de grupos).

Será demonstrado que, por outro lado, é possível derivar diretamente uma rede não cristalográfica N ao se atribuírem voltagens (h_i, t_i) ($i \in I$) de $\mathcal{H} \times \mathbb{Z}^n$ às cordas de uma árvore geradora num grafo finito P . De [28], sabe-se que o grupo \mathcal{G} gerado pelos pares (h_i, t_i) atua livremente sobre o grafo derivado infinito (atribuindo voltagens às cordas de P garante que o grupo \mathcal{G} , e não um subgrupo, atua sobre o grafo derivado). Se (i) todos os vértices possuem grau pelo menos 3 (o grafo derivado é pelo menos 3-regular) em P , (ii) diferentes voltagens são atribuídas às arestas em arestas múltiplas (o grafo derivado não possui arestas múltiplas) e os laços não possuem voltagem nula (não há laços na rede derivada), então o grafo derivado é uma rede. Agora será demonstrado que esta rede é uma rede periódica e que \mathcal{G} é um subgrupo do grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} desta rede.

Proposição 6.3.1. *Considere um grafo finito P como acima, com atribuição de voltagem no produto direto $\mathcal{H} \times \mathbb{Z}^n$, onde \mathcal{H} é qualquer grupo finito não abeliano. Então, o grafo derivado é uma rede NC n -periódica na qual o grupo não abeliano \mathcal{G} , gerado pelas voltagens, atua livremente. Em geral, \mathcal{G} é um subgrupo do grupo de automorfismos limitados da rede derivada.*

Demonstração. A todo relator $r = \prod_k h_{\theta_k}^{\epsilon_k}$ de \mathcal{H} com $\theta_k \in I$ e $\epsilon_k \in \{-1, 1\}$ (ver Definição 2.1.22), será associada a translação $s(r) = \sum_k \epsilon_k t_{\theta_k}$. Seja \mathcal{S} o subgrupo de \mathbb{Z}^n gerado pelas translações $s(r)$. Por construção, tem-se:

$$\prod_k (h_{\theta_k}, t_{\theta_k})^{\epsilon_k} = (e, s(r)),$$

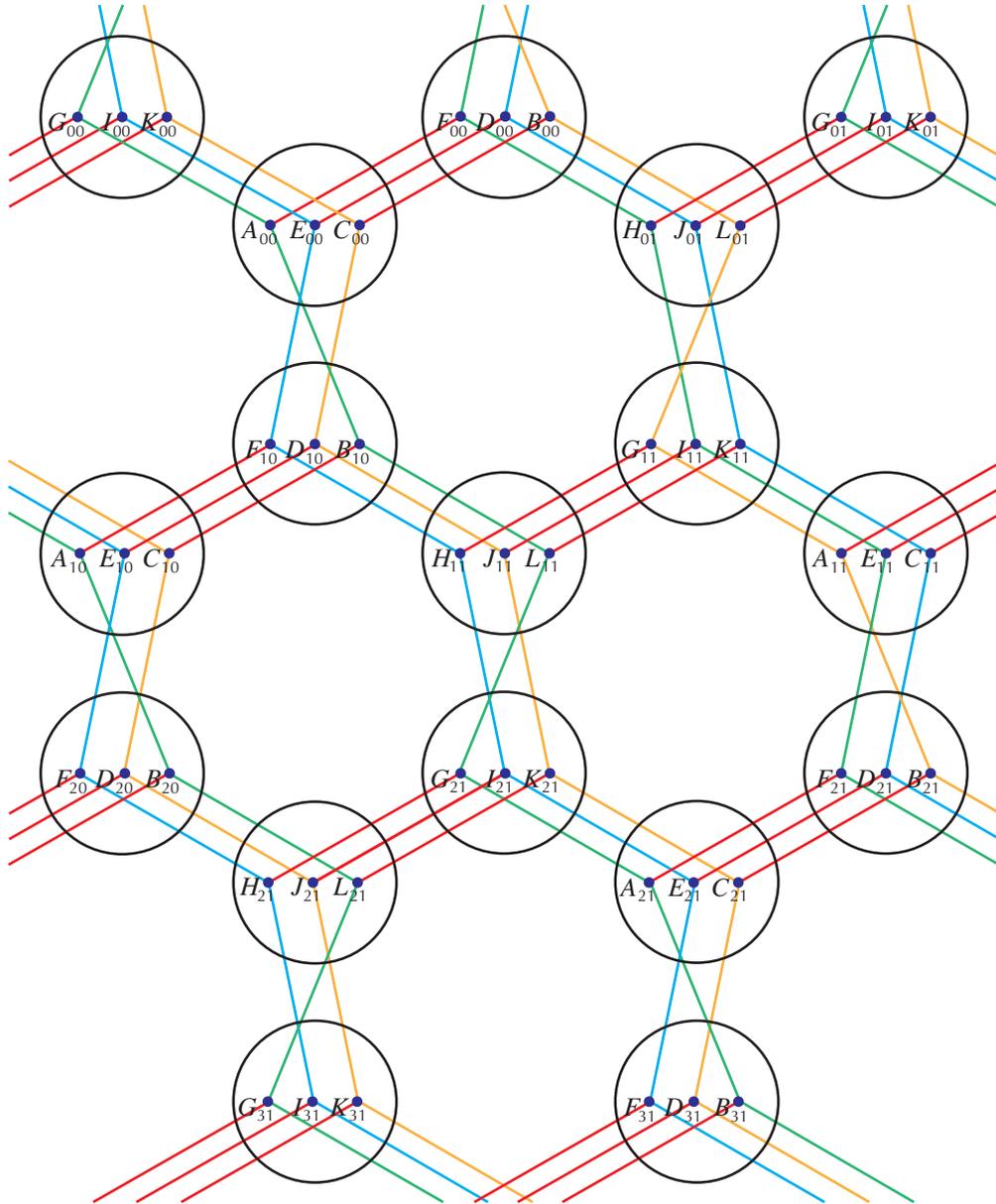


Figura 6.18: Uma representação pseudo-baricêntrica da rede NC derivada do grafo de voltagem dado na Figura 6.14. Os vértices que colidem na representação baricêntrica da rede foram segregados no interior de círculos negros e formam quatro classes: $\{A, C, E\}$, $\{B, D, F\}$, $\{G, I, K\}$, e $\{H, J, L\}$.

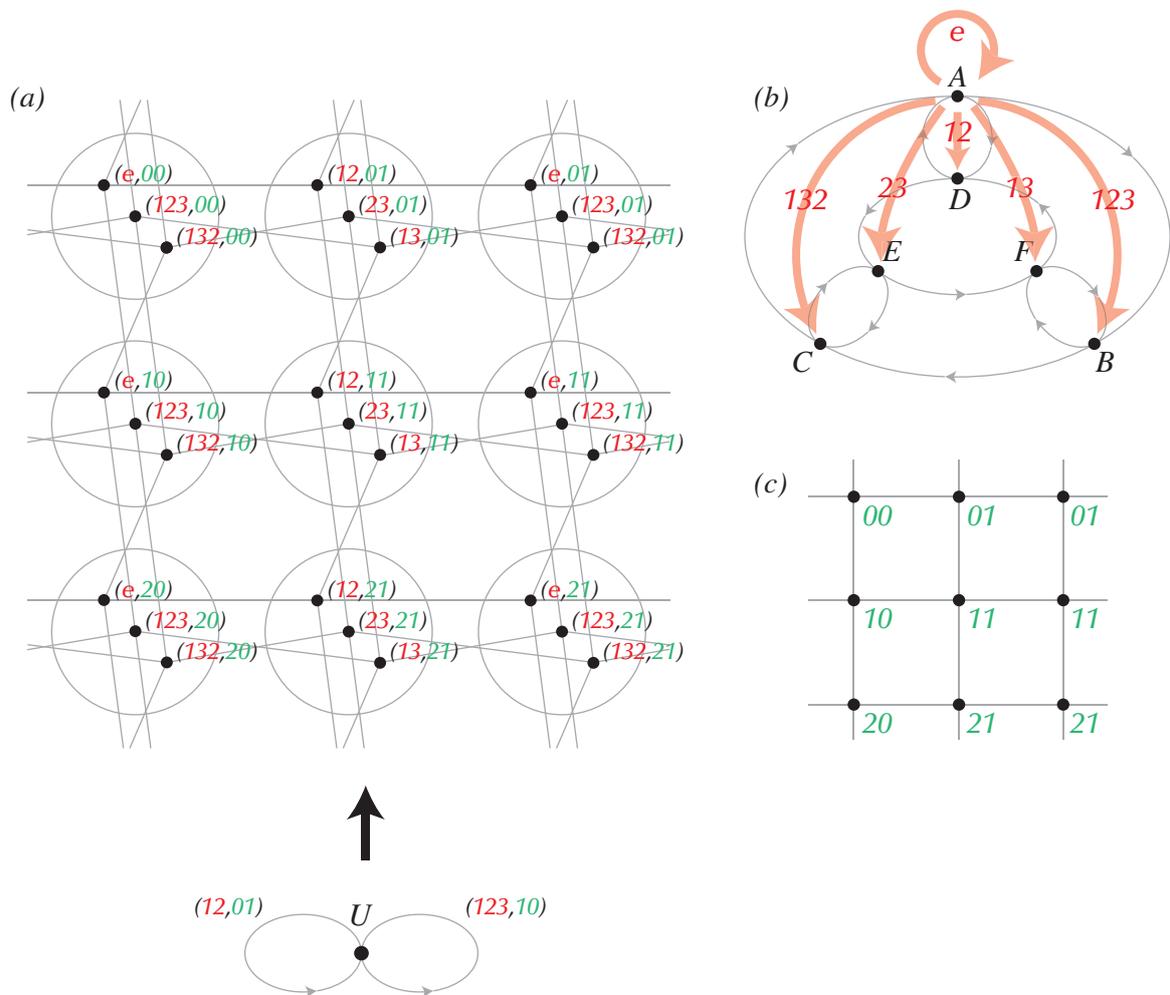


Figura 6.20: Todo automorfismo em \mathcal{B} está unicamente associado com um automorfismo em \mathcal{H} e uma translação da representação baricêntrica. Isto sugere inserir \mathcal{B} no produto direto $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^2$ usando a correspondência da Seção 6.2.1 quando se parte do buquê B_2 com voltagens $(12, 01)$ e $(123, 10)$ como grafo base, como pode ser visto em (a). Em (b) e (c), respectivamente, a permutação de \mathcal{H} no grafo quociente que indica a primeira coordenada de cada vértice, e a representação baricêntrica que fornece a segunda coordenada de cada vértice.

ser usada a Figura 6.20. Neste caso, $\mathcal{G} = \langle (12, 01), (123, 10) \rangle$, e o grafo finito P é o buquê B_2 com voltagens $(12, 01)$ e $(123, 10)$. O grupo não abeliano finito é \mathcal{S}_3 , gerado por $h_1 = 12$ e $h_2 = 123$.

Como 12^2 e 123^3 são relatores, satisfazem $r_1 = \prod_{k=1}^2 12^1 = 12^2$ e $r_2 = \prod_{k=1}^3 123^1 = 123^3$. As translações associadas aos relatores são $s(r_1) = \sum_{k=1}^2 1.01 = 01.2 = 02$ e $s(r_2) = \sum_{k=1}^3 1.10 = 10.3 = 30$; o subgrupo de translação associado a $s(r_1)$ e $s(r_2)$ é $\mathcal{S} = \langle 02, 30 \rangle$. Desta forma, tem-se $(12, 01)^2 = (e, 02)$ e $(123, 10)^3 = (e, 30)$, e assim pode-se concluir que $e \times \langle 02, 30 \rangle \cong \langle 02, 30 \rangle < \mathcal{T}$. É claro que $e \times \langle 02, 30 \rangle$ está contido no centro de \mathcal{G} . Como \mathcal{S}_3 é grupo finito, e cada elemento tem ordem finita, então o grupo de translações \mathcal{S} tem índice finito em \mathcal{G} e a rede derivada é periódica. Observe que $\langle (12, 01) \rangle = \{ \dots, (12, 01), (e, 02), (12, 03), (e, 04), \dots \}$, bem como $\langle (123, 10) \rangle = \{ \dots, (123, 10), (132, 20), (e, 30), (123, 40), \dots \}$, de onde é possível observar que $e \times \langle 02, 30 \rangle$ é subgrupo de translação da rede derivada, e que possui índice finito em $\mathcal{G} = \langle (12, 01), (123, 10) \rangle$.

Além disso, o quociente N/\mathcal{S} pode ser obtido derivando-se o buquê B_2 com voltagens 12 e 123 , conforme foi visto na Subseção 6.2.1, o que pode ser acompanhado pela Figura 6.2. As voltagens das arestas de N/\mathcal{S} podem ser obtidas dos levantamentos dos passeios fechados com voltagens $r_1 = 12^2$ e $r_2 = 123^3$ no buquê B_2 . Levantando-se o laço com voltagem 12 (percorrido duas vezes), obtém-se os três 2-ciclos de N/\mathcal{S} , com voltagens $s(r_1) = 01.2 = 02$. Levantando-se o laço com voltagem 123 (percorrido três vezes), obtém-se os dois 3-ciclos de N/\mathcal{S} , com voltagens $s(r_2) = 10.3 = 30$.

Com respeito aos automorfismos pode-se observar, por exemplo, que $\alpha = (12, 01)$ possui o correspondente ϕ_{12} em N/\mathcal{S} , como se pode acompanhar na Figura 6.4. Qualquer ciclo de N/\mathcal{S} e sua imagem são projetados sobre o mesmo passeio fechado no buquê B_2 , possuindo então a mesma voltagem em N/\mathcal{S} , o que permite concluir que α é automorfismo limitado de N .

Observe também que, como 12 tem ordem 2 em \mathcal{S}_3 , então $(12, 01)^2 = (e, 02)$, e com isso $(12, 02)$ atua como translação $t = 02/2 = 01$ sobre a representação baricêntrica da rede.

De acordo com a Proposição 6.3.1 pode-se produzir uma rede NC com grupo de automorfismo não abeliano que atua livremente a partir de qualquer rede cristalográfica simplesmente adicionando a primeira coordenada de permutação às voltagens em \mathbb{Z}^n de seu grafo de voltagem. Ambas as redes, a cristalográfica e a NC derivada, admitem a mesma representação baricêntrica. A Figura 6.21, por exemplo, mostra a rede NC derivada da rede do diamante ao se inserir voltagens 12 e 13 do grupo de substituição \mathcal{S}_3 como primeiras coordenadas para duas das quatro arestas de $K_2^{(4)}$. Às arestas restantes foi atribuída a identidade de \mathcal{S}_3 como primeira coordenada. Este grupo foi escolhido devido à simplicidade, uma vez que o

número de pontos que colidem é determinado pela ordem e pela estrutura do grupo de permutação.

Finalmente observa-se que não há limitação para a ordem do grupo de permutação. Como \mathcal{S}_n pode ser gerado a partir de apenas duas permutações, por exemplo, a e b , duas arestas num grafo com voltagens (a, s) e (b, t) em $\mathcal{S}_n \times \mathbb{Z}^p$ são suficientes para produzir uma rede NC com um grupo de automorfismos limitados que é um produto subdireto de $\mathcal{S}_n \times \mathbb{Z}^p$ (sendo assumido que a p -periodicidade é provida pelo conjunto de segundas coordenadas). Por exemplo, para qualquer inteiro n , podem ser atribuídas as duas voltagens $[12, (10)]$ e $[12\dots n, (01)]$ em $\mathcal{S}_n \times \mathbb{Z}^2$ aos laços de B_2 e assim deriva-se um grafo de voltagem com $n!$ vértices e $2 \times n!$ arestas, já que 12 e $12\dots n$ gera todo o grupo \mathcal{S}_n . A Figura 6.22 mostra o grafo de voltagem derivado do buquê B_2 com voltagens $[12, 10]$ e $[(1234), 01]$ em $\mathcal{S}_4 \times \mathbb{Z}^2$. Os pontos que colidem na representação baricêntrica são obtidos ao se aplicarem automorfismos da forma $(h, 0)$ ($h \neq e$) com o vetor nulo como segunda coordenada, uma vez que estes são automorfismos limitados não triviais da rede associados à translação nula de sua representação baricêntrica. Quando vetores independentes definem a segunda coordenada das voltagens em $\mathcal{S}_n \times \mathbb{Z}^p$, imediatamente verifica-se que colisões estão associadas ao subgrupo comutador $[\mathcal{S}_n, \mathcal{S}_n] = \mathcal{A}_n$, o subgrupo alternado com $|\mathcal{A}_n| = n!/2$. De fato, podem ser considerados dois automorfismos limitados (h_1, t_1) e (h_2, t_2) em $\mathcal{S}_n \times \mathbb{Z}^p$, e assim $[(h_1, t_1), (h_2, t_2)](V) = ([h_1, h_2], 0)(V) = (h_1^{-1}h_2^{-1}h_1h_2, 0)(V)$ para V vértice da rede. Desta forma, $(h_1h_2, 0)(V) = (h_2h_1, 0)(V)$, e como \mathcal{H} é não abeliano, as imagens (distintas) de V colidem na representação baricêntrica, pois a translação associada é nula. Esta observação justifica a ocorrência de colisões triplas na rede NC tipo diamante, e mostra que se deve esperar 12 pontos de colisão na representação baricêntrica da rede derivada de B_2 com voltagens em $\mathcal{S}_4 \times \mathbb{Z}^2$.

6.4 Considerações Adicionais

De acordo com os resultados anteriores, há infinitas redes NC de qualquer periodicidade com um grupo de automorfismos não abeliano que atua livremente. A construção acima mostra que o quociente N/\mathcal{T} de qualquer tal rede N com respeito a um grupo de translação maximal \mathcal{T} não possui automorfismos que preservam voltagens sobre seus ciclos, o que faz a identificação de uma rede NC pelo grafo quociente menos fácil. Os exemplos acima deixam claro que tais redes devem ser muito comumente geradas numa procura sistemática por novas redes a partir de seus grafos quociente. De fato, os três grafos quociente dados nas Figuras 6.7, 6.12 e 6.17 foram listados por [27] como os grafos quociente $3(4)2$, $3(4)4$ e $6(3)5$ de redes minimais 4-periódicas. É então importante examinar as ferramentas disponíveis para o reconhecimento de tais redes a partir dos seus grafos de voltagem. Felizmente, sabe-

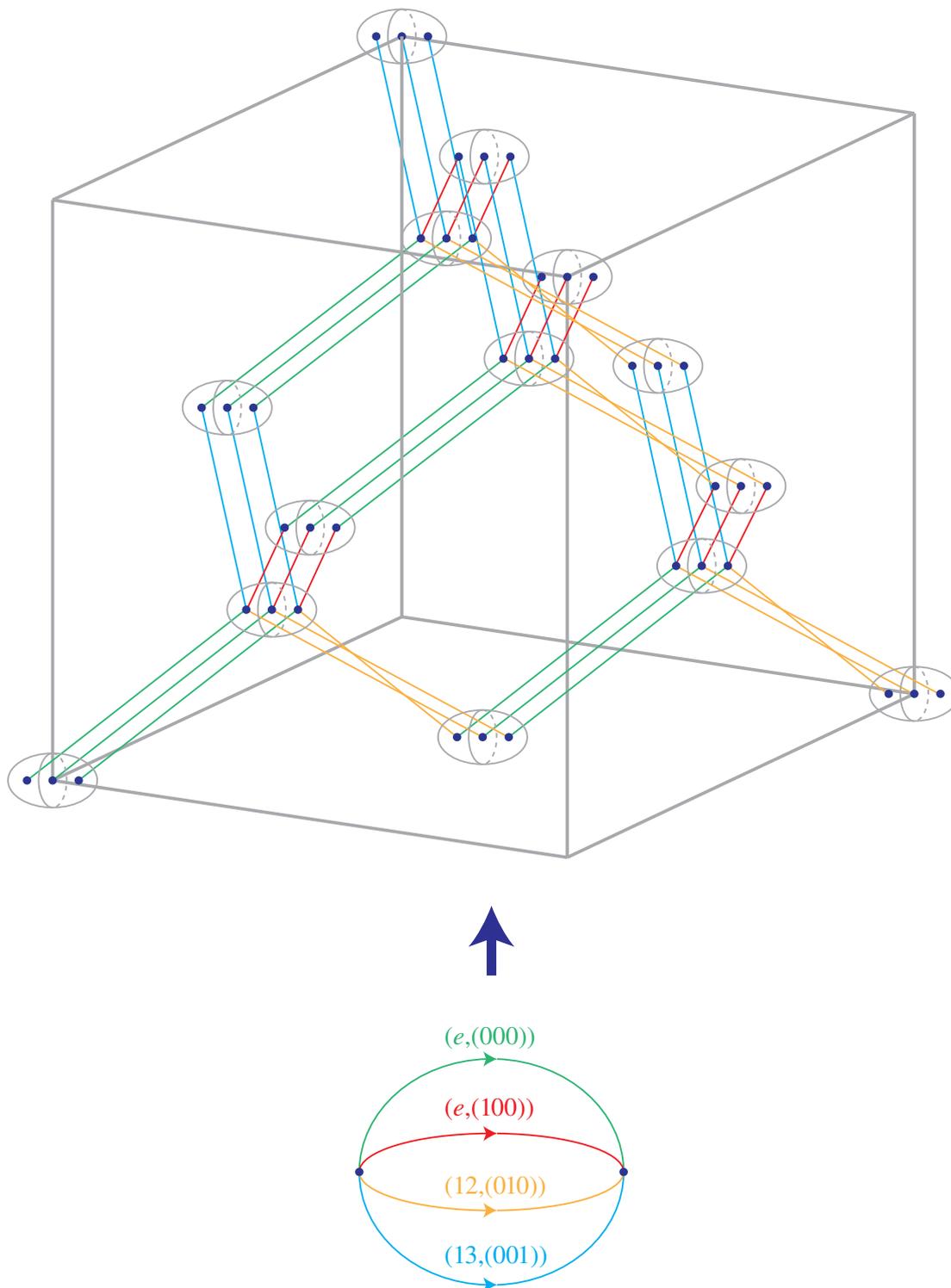


Figura 6.21: O grafo $K_2^{(4)}$ com voltagens em $\mathcal{S}_3 \times \mathbb{Z}^3$ e uma representação pseudo-baricêntrica (tipo diamante) da rede derivada.

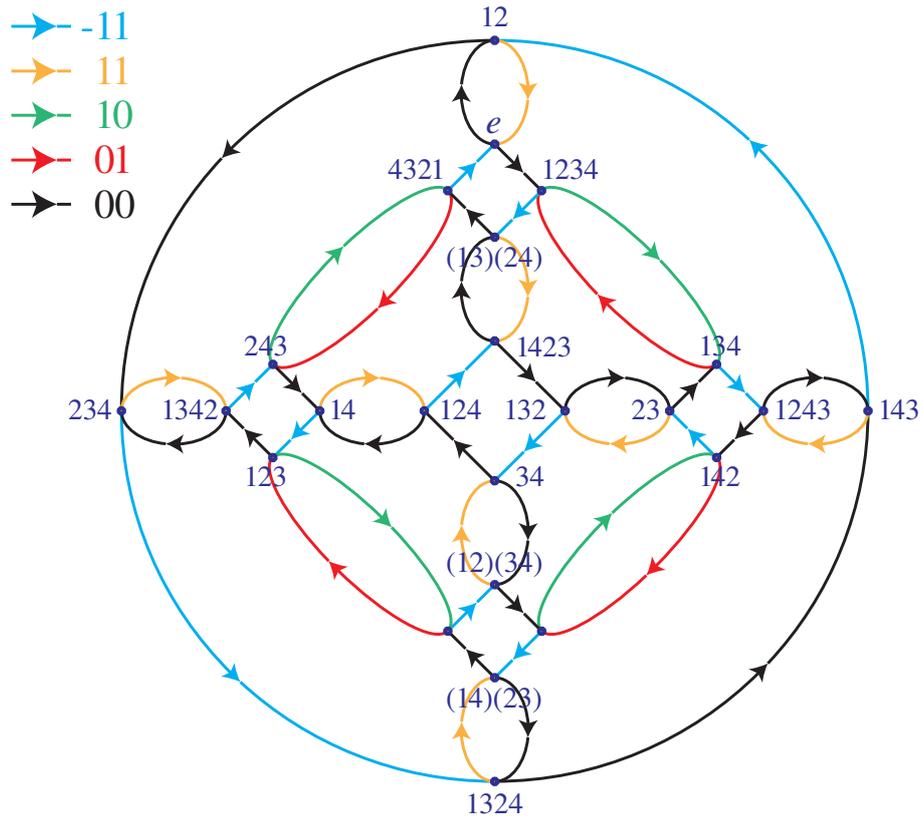


Figura 6.22: O grafo de tensão da rede NC obtido pela atribuição de tensões $(12, (10))$ e $(1234, (01))$ em $\mathcal{S}_4 \times \mathbb{Z}^2$ nos laços do buquê \mathcal{B}_2 . Os vértices são rotulados por permutações em \mathcal{S}_4 . Para maior clareza, as arestas são coloridas de acordo com suas tensões em \mathbb{Z}^2 . Note que a célula unitária da representação baricêntrica está centrada em relação à célula primitiva da rede.

se do Corolário 6.1.1 que as representações baricêntricas de tais redes apresentam colisões. Este não é, entretanto, um critério suficiente pois existem algumas redes cristalográficas reconhecidamente instáveis.

De uma forma geral, células expandidas devem ser usadas procurando N/\mathcal{S} a partir de N/\mathcal{T} . Se a rede admite um grupo de automorfismos limitados não trivial que atua livremente, abeliano ou não, deve haver um automorfismo do grafo quociente expandido que preserva a voltagem sobre ciclos equivalentes. Entretanto, é necessário algum critério relativo ao quociente, uma vez que não há limite para a quantidade de subgrupos com índice finito. Este é o papel do conceito de partição equivoltagem introduzido no próximo capítulo.

Finalmente, pode-se observar que os resultados expostos aqui também se aplicam a redes que admitem automorfismos limitados com pontos fixos. Deve apenas ser verdade que o grupo completo de automorfismos limitados admite um subgrupo não trivial (isto é, neste caso, não isomorfo a um subgrupo livre abeliano) que atua livremente sobre a rede.

Capítulo 7

Redes com Blocos Finitos de Imprimitividade para Grupos de Automorfismos Limitados

7.1 Introdução

Este capítulo aprofunda propriedades de redes que admitem blocos finitos não triviais de imprimitividade para automorfismos limitados. O objetivo é mostrar que as representações baricêntricas das redes NC com esta propriedade possuem colisões, cada bloco sendo representado por um ponto (Seção 7.4). Este é um dos resultados já publicados em **Non-crystallographic nets with finite blocks of imprimitivity for bounded automorphisms** [8]. Como consequência, o grafo de voltagem apresenta uma partição equitável que também respeita as voltagens sobre as arestas, introduzida como **partição equivoltagem** (Seção 7.5). Permutações possíveis dentro de blocos de imprimitividade e que são limitadas pela existência das arestas entre blocos são caracterizadas por **grupos de correlação** (Seção 7.6). Alguns exemplos não triviais de redes NC que possuem grupos de automorfismos limitados com e sem pontos fixos são explorados do ponto de vista das partições equivoltagem e dos grupos de correlação, e um algoritmo geral é proposto no fim (Seção 7.7). Também mostra-se que o grupo de automorfismos limitados de uma tal rede pode ser descrito utilizando-se produtos entrelaçados de grupos de permutações finitos por grupos de translações. Além dos exemplos anteriores, em particular do Capítulo 6, a teoria é aplicada também a três exemplos associados a empacotamentos esféricos ortorrômnicos, oriundos de um artigo recente [33] (Seção 7.8).

7.2 Vetores Representação e Representações Limitadas

Inicialmente, será dada maior atenção a representações com algumas propriedades adicionais. Seja d_E uma distância associada à métrica Euclidiana em \mathbb{R}^n . Diz-se que uma *bola euclidiana* centrada num ponto P e com raio r no espaço Euclidiano é o conjunto $B_r(P) = \{x \in \mathbb{R}^n : d_E(x, P) < r\}$ (é evidente que este conceito é diferente do conceito abstrato de bola, relativo a Teoria de Grafos). Um *conjunto limitado* no espaço Euclidiano é um conjunto cujos elementos estão localizados no interior de uma bola centrada na origem e com raio suficientemente grande. A representação ρ é dita *limitada* se $\rho(N)$ é um conjunto limitado, e diz-se que ela é *limitada por segmentos* se há um comprimento máximo l para a imagem de cada aresta: para todo e , $\|e\| \leq l$ (norma Euclidiana).

Não é difícil concluir que o grafo inteiro colapsa num único ponto numa representação baricêntrica de um grafo finito. No entanto, grafos infinitos podem apresentar representações baricêtricas limitadas não triviais, como o exemplo construído e descrito na Figura 7.1 (obviamente não periódica) para a árvore infinita derivada $K_2^{(3)}$ usando como voltagens dois geradores livres.

Agora serão introduzidos os conceitos de matriz Laplaciana e de vetor representação para uma representação de uma rede periódica. Em seguida, utilizando-se de tais ferramentas, serão demonstrados dois resultados importantes com respeito a redes periódicas limitadas e limitadas por segmentos.

Seja $G = (\mathbf{V}, \mathbf{E}, m)$ um grafo simples com $\mathbf{V} = \{V_1, \dots, V_n\}$ e $\mathbf{E} = \{e_1, \dots, e_m\}$; a matriz *adjacência* $A(G) = (a_{ij})_{n \times n}$ de G é definida por $a_{ij} = 1$ se $V_i V_j \in \mathbf{E}$ e $a_{ij} = 0$ caso contrário. A matriz *diagonal de graus* $D(G) = (d_{ij})_{n \times n}$ é definida por $d_{ij} = \deg(V_i)$ se $i = j$ e $d_{ij} = 0$ caso contrário. Finalmente, a matriz *Laplaciana* $L(G) = (l_{ij})_{n \times n}$ é definida por $L(G) = D(G) - A(G)$. Tais definições são trivialmente estendidas a grafos infinitos com um conjunto enumerável de elementos.

Considere uma representação ρ de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) ; como o conjunto de vértices $\mathbf{V}(N)$ é um conjunto enumerável, é possível definir uma sequência infinita $V_\rho = (\rho(V_1), \rho(V_2), \dots)$ contendo todos os pontos em $\rho(N)$. Chama-se tal sequência de *vetor representação*: V_ρ é unicamente determinado pela representação ρ ; por outro lado, V_ρ define uma representação da rede. Se L é a matriz Laplaciana de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) , então o produto $L.V_\rho$ é nulo para uma representação baricêntrica ρ , uma vez que as linhas deste produto definem exatamente as equações baricêtricas para todos os pontos de $\rho(N)$.

Exemplo 7.2.1. *Constrói-se o vetor representação (P_1, P_2, P_3, \dots) da rede quadrada de acordo com a ordem espiral da Figura 7.2. A matriz Laplaciana infi-*

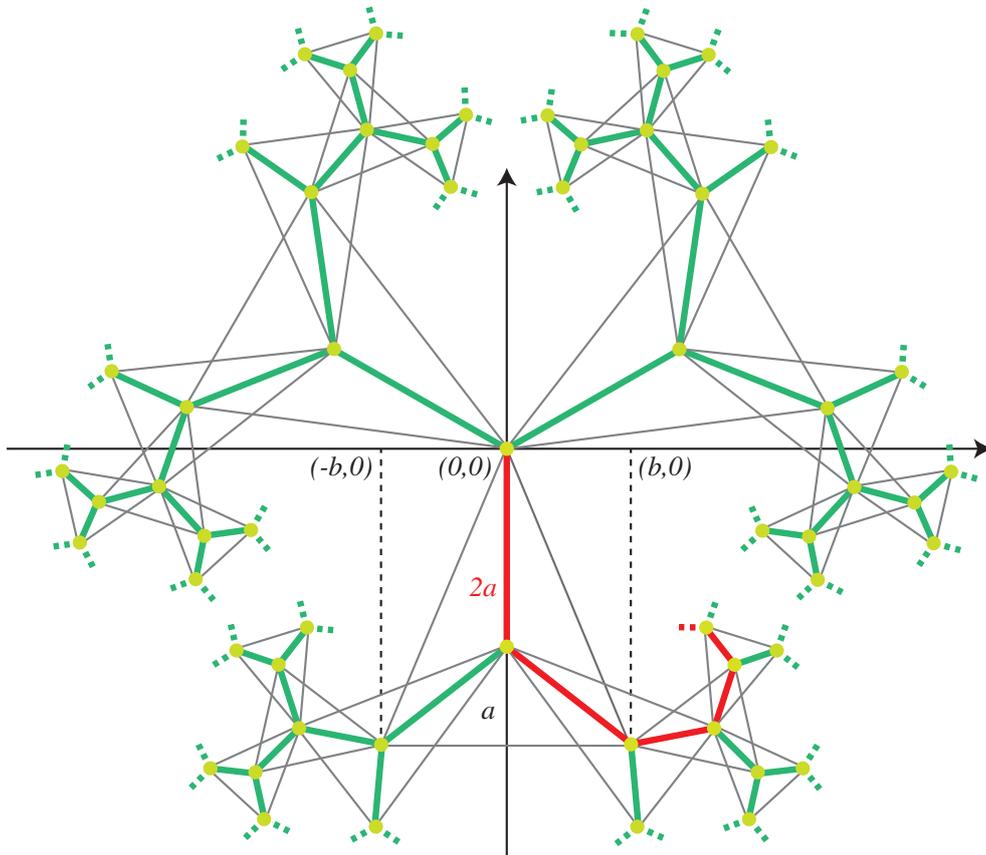


Figura 7.1: Um exemplo de uma representação baricêntrica limitada não trivial da árvore infinita regular de grau 3. A árvore foi construída começando na origem com uma 3-estrela simétrica, gerando 3 ramos. Em cada passo da construção, dois novos vértices são adicionados em cada ramo de modo a completar a vizinhança dos vértices de grau 1 (as folhas). Para tal, triângulos isósceles similares com parâmetro θ são desenhados de modo que cada folha está no baricentro e seus vizinhos estão nos vértices de um destes triângulos. Se $2a$ representa o tamanho da aresta terminal, então a base $2b$ do triângulo é dada por $b = a\theta$. Note que se $\theta = \sqrt{3}$ então i) a e b são constantes em cada passo e ii) a representação da rede **hcb** é obtida.

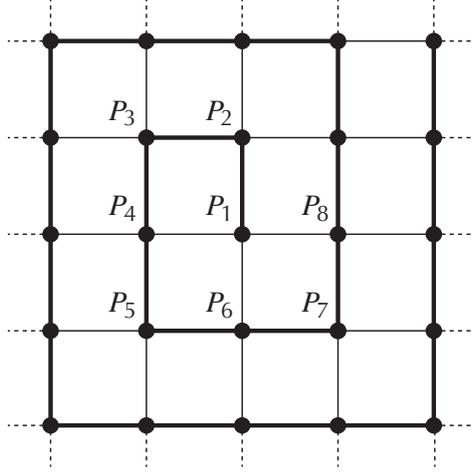


Figura 7.2: Uma representação baricêntrica da rede quadrada no espaço Euclidiano. O vetor representação pode ser definido com a sequência $(P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, \dots)$, obedecendo um padrão espiral.

rita L respeitando a mesma ordem de vértices é dada abaixo. A primeira linha da matriz Laplaciana, por exemplo, fornece a equação baricêntrica para o vértice P_1 : $4P_1 = P_2 + P_4 + P_6 + P_8$.

$$L = \begin{pmatrix} 4 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & \dots \\ 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{1} & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{1} & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \bar{1} & \dots \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 4 & \dots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Note ainda que, dada uma rede periódica (N, \mathcal{T}) e duas representações baricêntricas com vetores representação V_{ρ_1} e V_{ρ_2} , o vetor diferença $V_{\rho_1} - V_{\rho_2}$ descreve uma nova representação baricêntrica, já que a ordem dos pontos permanece inalterada e $L.(V_{\rho_1} - V_{\rho_2}) = L.V_{\rho_1} - L.V_{\rho_2} = 0$.

Lema 7.2.1. *Seja ρ uma representação baricêntrica limitada de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) tal que todo vértice em algum vértice-retículo é mapeado num mesmo ponto P . Então, $\rho(N) = P$.*

Demonstração. Suponha que na representação baricêntrica ρ de (N, \mathcal{T}) o vértice-

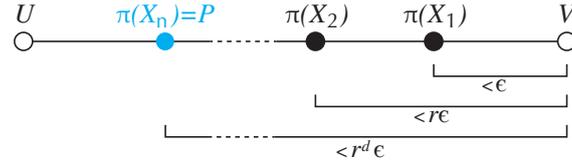


Figura 7.3: Uma sequência finita de pontos começando em $\pi(X_1)$, perto de um ponto de acumulação, até $P = \pi(X_n)$.

retículo $[A]$ colida num ponto P . Considere uma projeção ortogonal π de ρ sobre algum eixo contendo P ; claramente π também é uma representação baricêntrica limitada de N . Suponha que π cubra um intervalo aberto $]U, V[$. Como o bordo V é um ponto de acumulação de π , pode-se escolher um vértice X_1 tal que $\pi(X_1)$ está a uma distância menor que ϵ de V (veja a Figura 7.3). Observe agora que cada vértice na rede está a uma distância máxima (distância em termos de teoria de grafos) d de algum vértice em $[A]$, onde d é o diâmetro do grafo quociente N/\mathcal{T} (distância máxima entre dois pontos em N/\mathcal{T}). É então possível escolher um menor caminho $p = X_1X_2 \dots X_n$ com $X_n \in [A]$ e $n \leq d$. Denote por r o grau máximo dos vértices da rede. Como $\pi(X_1)$ é o baricentro dos pontos $\pi(Y_i)$, com Y_i vizinhos de X_1 , entre os quais está $\pi(X_2)$, este ponto está a uma distância menor que $r\epsilon$ do bordo V . A repetição do procedimento mostra que $\pi(X_n) = P$ está a uma distância menor que $r^d\epsilon$ de V , para qualquer valor de ϵ , contradição. Se, por outro lado, existe algum vértice X verificando $\pi(X) = V$, então todos os vizinhos de X devem colidir em V e, por indução, a rede inteira é mapeada em $V = P$. \square

Teorema 7.2.1. *Existe uma, e somente uma, representação baricêntrica limitada por segmentos de uma rede periódica que leva um dado vértice-retículo sobre algum ponto-retículo pré-definido no Espaço Euclidiano.*

Demonstração. A existência de uma representação baricêntrica periódica com uma dada base-retículo já é conhecida [4]. Sejam ρ_1 e ρ_2 duas (não necessariamente periódicas) representações baricêntricas de (N, \mathcal{T}) levando um dado vértice-retículo $[X]$ sobre algum ponto-retículo pré-definido no espaço Euclidiano. Como ambas as representações são baricêntricas e limitadas por arestas, o vetor diferença $R = V_{\rho_1} - V_{\rho_2}$ define uma representação baricêntrica limitada de (N, \mathcal{T}) que leva o vértice-retículo $[X]$ na origem do espaço. De acordo com o Lema 7.2.1, esta representação colapsa na origem, de modo que $V_{\rho_1} = V_{\rho_2}$. \square

Os dois últimos resultados serão ferramentas importantes para os teoremas da Seção 7.4, onde será demonstrado que as representações baricêntricas de redes NC que admitem um sistema de imprimitividade com blocos finitos para automorfismos limitados sempre apresentam colisões de vértices.

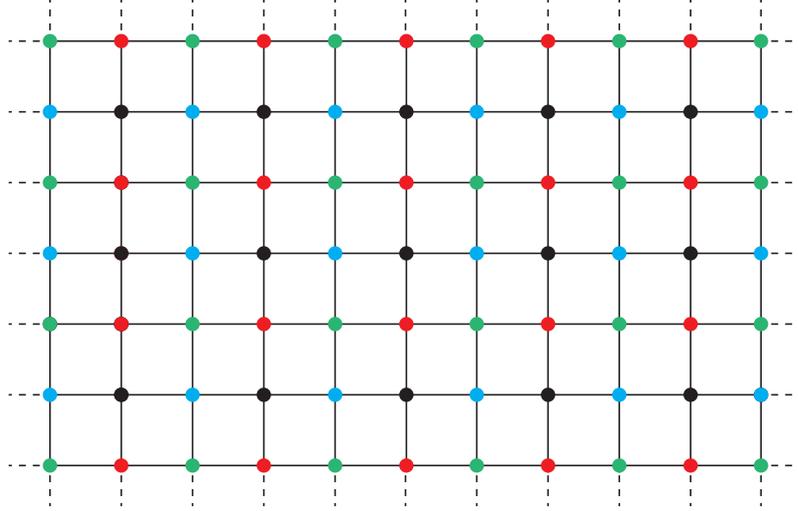


Figura 7.4: Um exemplo de partição do conjunto de vértices em blocos (infinitos) de imprimitividade para o grupo de automorfismos limitados. Para **sql**, \mathcal{B} é composto apenas por translações, e é fácil ver que elas preservam a partição: cada cor representa um bloco, e para um bloco Δ tem-se sempre $\Delta \cap t(\Delta) = \emptyset$ ou $\Delta \cap t(\Delta) = \Delta$.

7.3 Imprimitividade em Redes Periódicas

Seja G um grafo finito ou infinito e $\mathcal{H} \leq \text{Aut}(G)$. Aplicando o que foi visto na Seção 2.2, G é dito \mathcal{H} -transitivo se, dados dois vértices U e V em $\mathbf{V}(G)$, sempre se pode encontrar um automorfismo $h \in \mathcal{H}$ tal que $V = h(U)$. Num grafo \mathcal{H} -transitivo G , uma partição do conjunto de vértices $\mathbf{V}(G)$ é dita um sistema de imprimitividade para \mathcal{H} se \mathcal{H} preserva a partição, isto é, se qualquer automorfismo $h \in \mathcal{H}$ leva o bloco Δ num bloco $h(\Delta)$ [12]. Também se pode dizer que se Δ é um bloco para o grupo de automorfismos \mathcal{H} e $h \in \mathcal{H}$, então ou $\Delta \cap h(\Delta) = \emptyset$ ou $\Delta \cap h(\Delta) = \Delta$. Se os blocos consistem apenas em conjuntos unitários de vértices, ou se o conjunto de vértices inteiro é um bloco, o sistema de imprimitividade é então dito trivial. Se todos os sistemas de imprimitividade para um grupo \mathcal{H} são triviais, então a ação de \mathcal{H} é dita primitiva. Observe que um sistema de imprimitividade é completamente descrito conhecendo-se um simples bloco.

Para a análise de redes periódicas (N, \mathcal{T}) , será considerado o subgrupo $\mathcal{H} = \mathcal{B}$ de todos os automorfismos limitados. Entretanto, observe que redes p -periódicas são imprimitivas para grupos de translação. Por exemplo, no caso da rede quadrada pode-se considerar como um bloco o subconjunto infinito $\Delta = \{s(O) : s \in S = \langle (2, 0), (0, 2) \rangle\}$ onde O é algum vértice da rede (veja a Figura 7.4). Por outro lado, a existência de blocos finitos de imprimitividade não é uma propriedade trivial para redes periódicas. Diz-se que a ação de \mathcal{B} sobre o grafo N é *finitamente primitiva* se não há blocos finitos não triviais de imprimitividade, ou seja, se N não admite para \mathcal{B} partição do conjunto de vértices com blocos finitos não triviais de imprimitividade. Neste caso, diz-se que o grupo \mathcal{B} é *finitamente primitivo* sobre N .

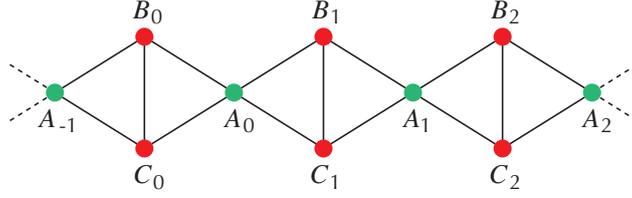


Figura 7.5: Um exemplo de um grafo 1-periódico que possui um sistema de imprimitividade com dois vértices por bloco $\{B_i, C_i\}$ e blocos com um só vértice $\{A_i\}$.

Redes periódicas não são geralmente \mathcal{B} -transitivas; entretanto, o número de \mathcal{B} -órbitas é finito, e as definições acima podem ser aplicadas a cada órbita separadamente. Em particular, um sistema de imprimitividade para a rede é completamente descrito fornecendo-se um bloco por \mathcal{B} -órbita. Resulta que a ação de \mathcal{B} sobre uma rede (N, \mathcal{T}) é imprimitiva sempre que ela o for em toda \mathcal{B} -órbita. Neste caso é usada uma cor diferente para cada \mathcal{B} -órbita nas figuras, o que ajuda a destacar os blocos de imprimitividade. O grafo da Figura 7.5, por exemplo, possui duas \mathcal{B} -órbitas, destacadas em verde e vermelho, respectivamente. A ação de \mathcal{B} sobre a verde é finitamente primitiva, uma vez que o único bloco finito contém um vértice único; a órbita vermelha admite o conjunto $\{B_0, C_0\}$ como um bloco de imprimitividade, de modo que a ação de \mathcal{B} não é finitamente primitiva. Note que a ação de $\mathcal{B} = \mathcal{T}$ numa rede cristalográfica (N, \mathcal{T}) é finitamente primitiva.

7.4 Grupos de Automorfismos Limitados e Sistemas de Imprimitividade

Agora consideram-se redes não cristalográficas para as quais existe automorfismo não trivial fixando um vértice-retículo. Por exemplo, no grafo 1-periódico da Figura 7.5 o vértice-retículo $[A]$ é fixado (ponto a ponto) por ϕ_I . Pode ser verificado que representações periódicas baricêntricas deste grafo apresentam colisões: vértices B_i e C_i colidem para todo $i \in \mathbb{N}$. Este resultado é consequência imediata do Teorema 7.2.1.

Corolário 7.4.1. *Suponha que exista um automorfismo f não trivial na rede periódica (N, \mathcal{T}) que fixa todo vértice num vértice-retículo $[X]$. Então qualquer vértice em (N, \mathcal{T}) colide com sua imagem por f em qualquer representação periódica baricêntrica da rede no espaço Euclidiano.*

Demonstração. Seja ρ uma representação periódica baricêntrica de (N, \mathcal{T}) . Então a aplicação $\rho' : U \mapsto \rho[f(U)]$ é também uma representação baricêntrica de (N, \mathcal{T}) e é claramente limitada por segmentos. Além disso, para qualquer vértice $U \in [X]$, tem-se $\rho'(U) = \rho[f(U)] = \rho(U)$ de modo que ambas as representações levam o vértice-retículo $[X]$ no mesmo ponto-retículo. Assim, de acordo com o Teorema 7.2.1,

$\rho' = \rho$. Agora, como f não é o automorfismo trivial, existe algum vértice V com $f(V) \neq V$; para este vértice pode-se dizer que $\rho[f(V)] = \rho'(V) = \rho(V)$, mostrando que V e sua imagem $f(V)$ colidem na representação ρ . \square

A existência de automorfismos não triviais fixando um ou mais vértice-retículos em redes NC não é uma regra, mas afortunadamente o resultado pode ser estendido a redes periódicas que possuem automorfismos que estabilizam blocos finitos de imprimitividade.

Corolário 7.4.2. *Seja (N, \mathcal{T}) uma rede periódica com um sistema não trivial σ de blocos finitos de imprimitividade para o subgrupo de automorfismos limitados \mathcal{B} . Denote por \mathcal{B}_σ o subgrupo de \mathcal{B} que estabiliza cada bloco em σ e suponha que \mathcal{B}_σ seja transitivo em cada bloco. Então qualquer representação baricêntrica no espaço Euclidiano de (N, \mathcal{T}) apresenta colisões de vértices, cada bloco sendo representado por um único ponto.*

Demonstração. Note que σ é periódica, já que $T \subset \mathcal{B}$. Denota-se por $\sigma(X)$ o bloco de σ contendo X . Será definida uma rede periódica abstrata auxiliar N_σ com conjunto de vértices $\mathbf{V}(N_\sigma) = \mathbf{V}(N) \cup \sigma$ e conjunto de arestas $\mathbf{E}(N_\sigma) = \mathbf{E}(N) \cup \{X\sigma(X) : X \in \mathbf{V}(N)\}$. Então, blocos são abstratamente considerados como novos elementos do conjunto de vértices e ligados aos vértices que os constituem. É claro que N_σ admite \mathcal{T} como grupo de translação, de modo que se pode considerar a grade periódica (N_σ, T) (a 3-conectividade não pode ser assegurada). Define-se agora $g_\sigma \in B(N_\sigma)$ pela extensão de $g \in \mathcal{B}_\sigma$ a seguir. Para todo $X \in \mathbf{V}(N)$, tem-se $g_\sigma(X) = g(X)$ e $g_\sigma[\sigma(X)] = \sigma(X)$. De acordo com o Corolário 7.4.1, todos os vértices num bloco colidem numa representação periódica baricêntrica de (N_σ, T) . O vértice adicionado $\sigma(X)$, por estar no baricentro dos vértices que colapsam num ponto, também colapsa neste ponto, o que significa que a dada representação baricêntrica periódica de (N_σ, T) também é uma representação baricêntrica periódica de (N, \mathcal{T}) , mas possivelmente com pesos diferentes (o peso de um dado bloco é o número de arestas ligando este bloco ao central). \square

Exemplo 7.4.1. *Um exemplo onde é explicitada uma representação do grafo abstrato N_σ , com a notação usada na demonstração do Corolário 7.4.2, gerado a partir do grafo N 1-periódico encontrado na Figura 7.5, pode ser observado na Figura 7.6. O grafo em preto representa o grafo original N da Figura 7.5. Os blocos Δ_i e Ω_i , $i \in \mathbb{Z}$ de forma abstrata acrescentados como vértices estão em verde e vermelho. As arestas em verde e vermelho ligam os vértices abstratos aos vértices do grafo original.*

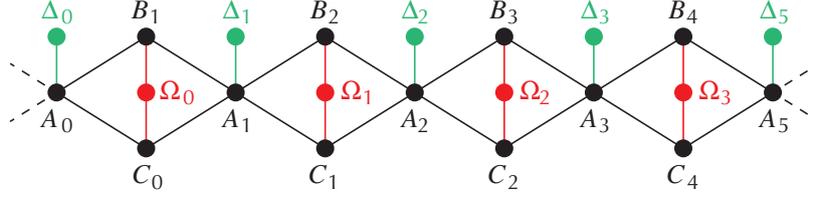


Figura 7.6: Uma representação para um grafo N_σ gerado a partir do grafo 1-periódico da Figura 7.5. O grafo em preto representa o original. Os blocos são acrescentados como vértices em verde e vermelho. São também criadas arestas em verde e vermelho ligando os vértices criados a partir dos blocos aos vértices que compõem tais blocos no grafo original.

Um exemplo de representação baricêntrica com pesos desiguais é dado na Seção 7.5.3. Também é importante notar que alguns blocos não equivalentes podem colapsar num ponto único da representação baricêntrica como mostrado na Seção 7.5.1.

7.5 Partições Equivoltagem

Definição 7.5.1. *Uma partição do conjunto de vértices em subconjuntos Δ_i , chamados células, é equitável se o número de vizinhos em Δ_j de um vértice U em Δ_i é uma constante δ_{ij} , isto é, é independente do vértice U escolhido [17].*

Órbitas por algum grupo de automorfismos formam uma partição equitável, uma vez que as relações de incidência são preservadas. Assim, um sistema de blocos finitos de imprimitividade para o subgrupo dos automorfismos limitados forma uma partição equitável σ de uma rede NC se o subgrupo estabilizador de blocos \mathcal{B}_σ é transitivo. Como σ é também periódica, esta partição se projeta numa partição equitável do grafo quociente N/\mathcal{T} . Além disso, todas as arestas ligando dois blocos dados são representadas pelo mesmo segmento de reta numa representação periódica, baricêntrica da rede: é então possível atribuir o mesmo rótulo vetorial a todas as arestas representativas no grafo de voltagem. Esta observação, junto com a próxima definição, conduz à introdução do conceito de partição equivoltagem.

Definição 7.5.2. *Um multiconjunto é um par (X, m) onde X é um conjunto e $m : X \rightarrow \mathbb{N}^*$ é uma aplicação que associa a cada elemento de X um número natural positivo.*

Diz-se que m é a *aplicação multiplicidade*, e que a multiplicidade de um elemento $x \in X$ é igual a $m(x)$. Num multiconjunto, assim como num conjunto, a ordem dos elementos é irrelevante.

Exemplo 7.5.1. *No multiconjunto $X = \{a, b, b, b, c, c, c, c, c, d, e\}$, o elemento b tem multiplicidade 2, o elemento c tem multiplicidade 5 e os elementos a, d e e têm*

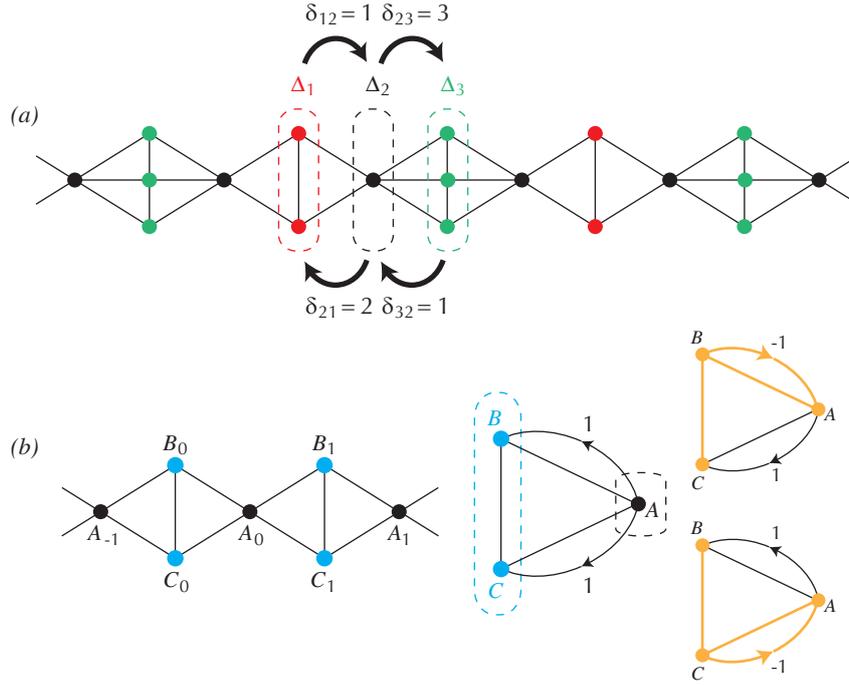


Figura 7.7: Em (a), uma grade 1-periódica com uma partição equitável do conjunto de vértices. Em (b), outra grade 1-periódica com seu grafo quociente e uma partição equivoltagem. Os multiconjuntos iguais a $\{0, 0, -1\}$, com arestas partindo de B e C , em destaque amarelo.

multiplicidade 1. Observe que o multiconjunto $Y = \{a, b, c, d, e\}$, onde todos os elementos possuem multiplicidade 1, é diferente do multiconjunto X .

Definição 7.5.3. *Uma partição do conjunto de vértices de um grafo de voltagem é dita uma partição equivoltagem se i) ela é uma partição equitável e ii) os multiconjuntos das voltagens das b_{ij} arestas entre os vértices U e V nas células Δ_i e Δ_j são iguais.*

Exemplo 7.5.2. *Observe na Figura 7.7(a) um exemplo de partição equitável do conjunto de vértices de uma grade 1-periódica. São dados como exemplos três blocos Δ_1 , Δ_2 e Δ_3 . Seguindo a Definição 7.5.1, o número de vizinhos em Δ_2 (preto) de um vértice qualquer em Δ_1 (verde) é igual a $\delta_{12} = 1$. Analogamente as outras relações são expostas. Em (b), pode-se ver uma grade 1-periódica, seu grafo quociente com uma partição equivoltagem (duas células, uma em azul e a outra em preto) e os multiconjuntos de voltagens correspondentes iguais a $\{0, 0, -1\}$ com arestas partindo de B e C que estão na célula azul em destaque na cor amarela.*

Consequentemente, grafos de voltagem de redes NC admitindo um sistema estável, transitivo de blocos finitos de imprimitividade apresentará uma partição equivoltagem de seu conjunto de vértices se a origem for adequadamente escolhida em cada vértice-retículo. A Figura 7.8 ilustra a importância desta configuração; se

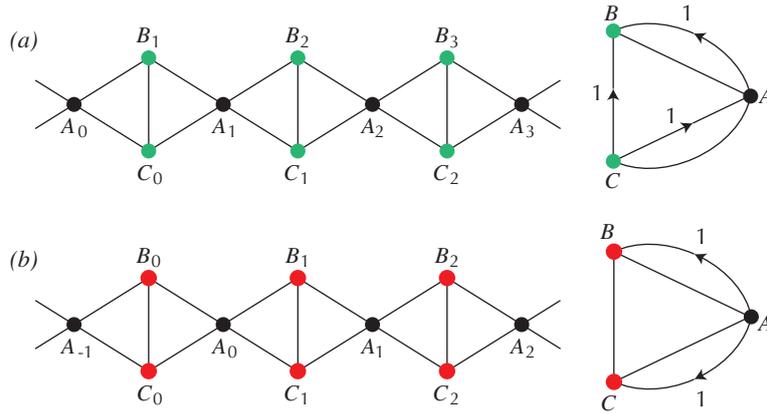


Figura 7.8: Um grafo 1-periódico com um sistema de blocos finitos de imprimitividade e dois grafos de voltagem: (a) sem partição equivoltagem e (b) com uma partição equivoltagem.

$$\begin{array}{ccc}
 N & \xrightarrow{\sigma} & N/\sigma \\
 q_{\mathcal{T}} \downarrow & & \downarrow q_{\mathcal{T}} \\
 N/\mathcal{T} & \xrightarrow{\theta} & Q
 \end{array}$$

Figura 7.9: Definição esquemática do quociente Q por uma partição equivoltagem do grafo quociente N/\mathcal{T} de uma rede periódica (N, \mathcal{T}) .

as origens de vértice-retículos equivalentes não são escolhidas no mesmo bloco de imprimitividade, então o grafo de voltagem não apresenta uma partição equivoltagem.

Os seguintes exemplos mostram que todas as redes NC conhecidas até agora podem ser mapeadas num grafo de voltagem com partição equivoltagem. Estes exemplos ilustram diferentes relações entre redes NC e suas representações periódicas, baricêntricas interpretadas sob o prisma de uma partição equivoltagem e seus grafos de voltagem.

A propriedade mais importante está esquematizada no diagrama da Figura 7.9. Para a rede periódica (N, \mathcal{T}) com sistema de imprimitividade σ , pode-se construir o quociente N/σ cujos vértices são os blocos $\sigma(X)$ para X em $V(N)$. Como as duas redes N e N/σ admitem o mesmo grupo de translação \mathcal{T} , pode-se também construir seu grafos quociente com voltagens em \mathcal{T} . O diagrama pode agora ser completado com um homomorfismo θ levando N/\mathcal{T} ao seu quociente Q pela partição equivoltagem e definido por $\theta([X]_{\mathcal{T}}) = [\sigma(X)]_{\mathcal{T}}$; observe que θ preserva voltagens no sentido de que ele leva arestas de N/\mathcal{T} em arestas de Q com mesma voltagem em \mathcal{T} . Como consequência, arestas em N entre vértices do mesmo bloco são levadas

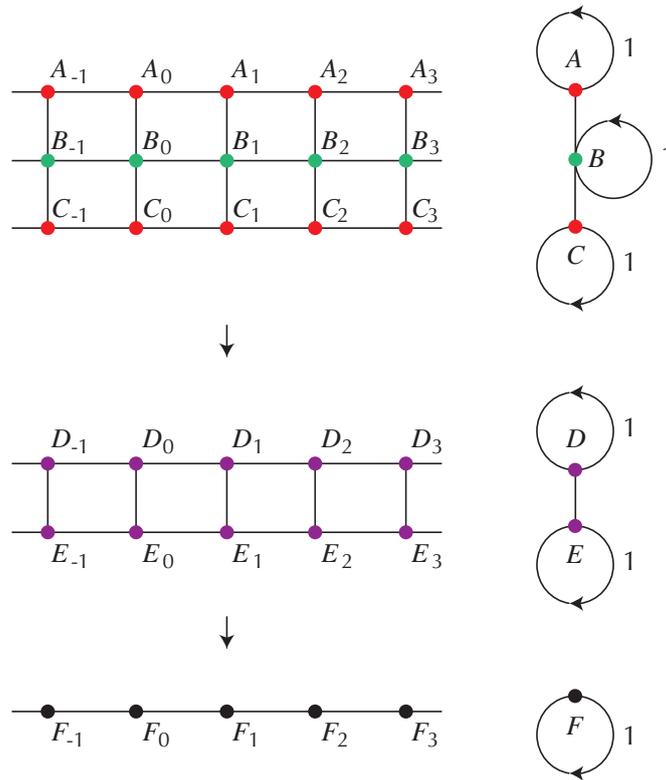


Figura 7.10: No topo, a escada dupla com com dois blocos finitos de imprimitividade não equivalentes mostrados em verde e vermelho e seu grafo quociente. No fim, a sua representação baricêntrica (o caminho infinito).

a um laço com voltagem nula em Q : tais laços devem ser deletados. É importante enfatizar que o quociente Q pode ser obtido diretamente de N/\mathcal{T} e traz informações imediatas sobre a representação baricêntrica de N com colisões, como se vê no exemplo da *escada dupla*.

7.5.1 A Escada Dupla

A Figura 7.10 mostra a rede 1-periódica da escada dupla com três vértice-retículos: $[A]$, $[B]$ e $[C]$. Há dois blocos de imprimitividade não equivalentes $\{A_0, C_0\}$ e $\{B_0\}$; consequentemente, de acordo com o Corolário 7.4.2, é esperada a colisão dos vértice-retículos $[A]$ e $[C]$ na representação baricêntrica. De fato, os três vértice-retículos colidem num único vértice-retículo, pois a rede N/σ também é uma rede NC (a escada) com sistema de blocos finitos de imprimitividade estável, transitivo, $\{D_i, E_i\}$. Grafos quociente fornecem um claro entendimento sobre estes fatos. O grafo quociente da escada dupla apresenta uma partição equivoltagem com duas células: $\{A, C\}$ e $\{B\}$; o respectivo quociente Q é precisamente o grafo de voltagem da escada simples. Assim, ele também apresenta uma partição equivoltagem com uma única célula $\{D, E\}$ cujo quociente é um laço.

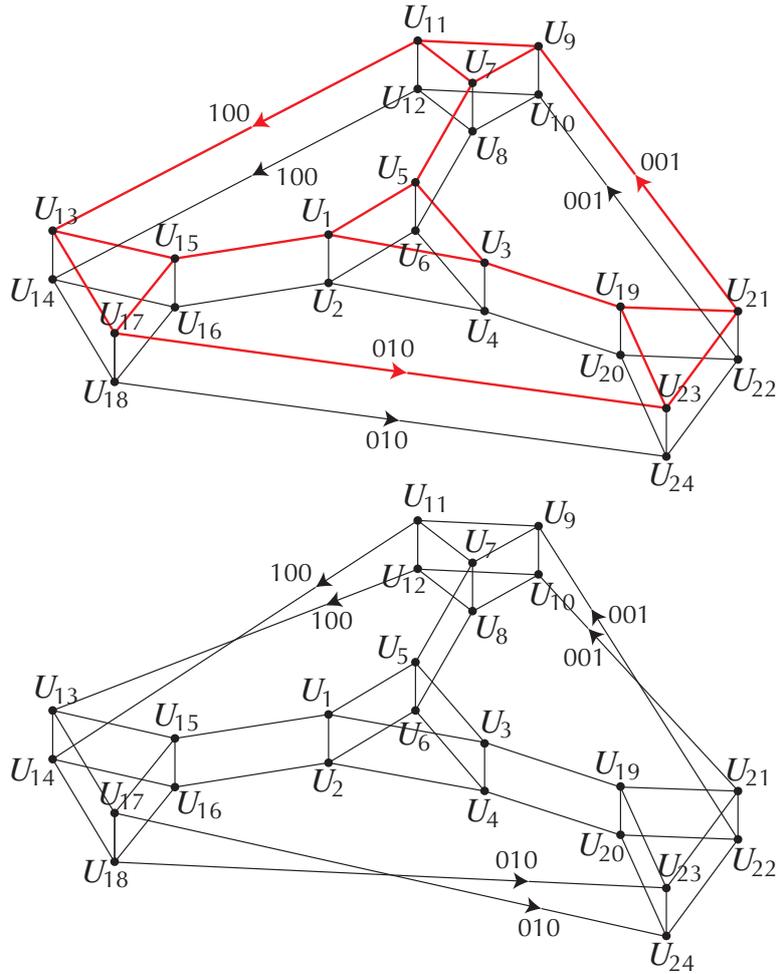


Figura 7.11: Os grafos de voltagem (de cima para baixo) de **uld-z** e **uld** com a partição equivoltagem $\theta = \{\{U_1, U_2\}, \{U_3, U_4\}, \dots, \{U_{23}, U_{24}\}\}$. O quociente por θ exposto como o subgrafo vermelho de **uld-z** é isomorfo ao grafo de voltagem da rede cristalográfica **srs-a**.

7.5.2 As redes NC **uld** e **uld-z**

A Figura 7.11 mostra os grafos de voltagem dos dois empacotamentos esféricos cúbicos inicialmente classificados como $4/3/c25$ e $4/3/c26$ por Fisher [34] e hoje codificados como **uld** e **uld-z** no banco de dados de redes cristalinas da Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR) [25].

Primeiramente observa-se que ambos os grafos quociente apresentam o mesmo automorfismo $\varphi = \prod_{k=1, \dots, 12} (U_{2k-1}, U_{2k})$, agindo como um espelho em cada prisma trigonal. Em ambos os casos, φ preserva voltagens nos ciclos do grafo e fixa as arestas dos prismas, indicando a existência na rede de um automorfismo limitado, $\phi = \prod_{t \in \mathcal{T}, k=1, \dots, 12} (tU_{2k-1}, tU_{2k})$, que comuta com os respectivos grupos de translação. Consequentemente, ambas as redes são não cristalográficas e, como tal, possuem mais de um grupo de translação maximal. Serão chamados de i , j e k os três geradores do grupo de translação de **uld**; os três automorfismos $i\phi$, $j\phi$ e $k\phi$ formam

os geradores de um grupo de translação isomorfo para esta rede. Pode ser verificado que o grafo de voltagem de **uld** relativamente a este novo grupo de translação é isomorfo ao de **uld-z**. Consequentemente, **uld** e **uld-z** são redes isomorfas mas com estruturas periódicas diferentes. Isto explica por que todos os invariantes topológicos de **uld** e **uld-z** são idênticos apesar de apresentarem representações não ambientalmente isotópicas ¹.

A partição $\sigma = \{tU_{2k-1}, tU_{2k} : t \in \mathcal{T}, k = 1, \dots, 12\}$ forma um sistema de blocos finitos de imprimitividade para cada rede que é estabilizado bloco a bloco pelo subgrupo transitivo $\mathcal{B}_\sigma = \{1, \phi\}$. Assim, ambos os grafos de voltagem apresentam uma partição equivoltagem formada pelas arestas dos prismas triangulares; o quociente é dado na Figura 7.11 pelo subgrafo vermelho do quociente de **uld-z**. Este é isomorfo ao grafo quociente de **srs-a**, a rede cristalográfica obtida de **srs** por decoração. Foi verificado que as três redes **uld**, **uld-z** e **srs-a** são isomegéticas, ou seja, possuem a mesma representação baricêntrica periódica onde, de acordo com o Corolário 7.4.2, todas as arestas dos prismas triangulares colapsam.

7.5.3 Um duplo hcb

Vale a pena ilustrar a existência de pesos desiguais em representações periódicas, baricênticas das redes (N_σ, \mathcal{T}) e (N, \mathcal{T}) (com as notações dadas na prova do Corolário 7.4.2).

A Figura 7.12 mostra uma rede NC obtida por duplicação de **hcb** e seu grafo de voltagem com uma partição equivoltagem. O quociente por esta partição é o grafo $K_2^{(3)}$ como esperado. Cada bloco de imprimitividade possui dois vértices; estes podem ser trocados por automorfismos limitados que agem como um tipo de reflexão local na rede. Cada bloco é ligado por arestas duplas a dois outros blocos enquanto é ligado por uma aresta quádrupla a um terceiro bloco. Como resultado, as três arestas têm pesos 1, 1 e 2 respectivamente na representação periódica, baricêntrica do quociente N/σ , como mostrado na Figura 7.13.

7.5.4 Um triplo sql

Agora será considerada a rede NC mostrada na Figura 7.14, já vista na Seção 6.2.1. Contrastando com a escada dupla e com **uld** e **uld-z**, o subgrupo dos automorfismos limitados desta rede atua livremente sobre a mesma. Entretanto, esta rede também apresenta um sistema de blocos finitos de imprimitividade: $\sigma = \{A_{ij}, B_{ij}, C_{ij}\}, \{D_{ij}, E_{ij}, F_{ij}\} : i, j \in \mathbb{Z}\}$.

¹Uma isotopia ambiente é um conceito de Teoria de Nós distante dos objetivos deste trabalho, mas o resultado merece citação. Define-se como isotopia ambiente uma deformação contínua de um nó, ou ligação. Numa isotopia ambiente, uma curva é transformada em outra preservando características topológicas, de modo que não haja cortes ou autointerseções. [35]

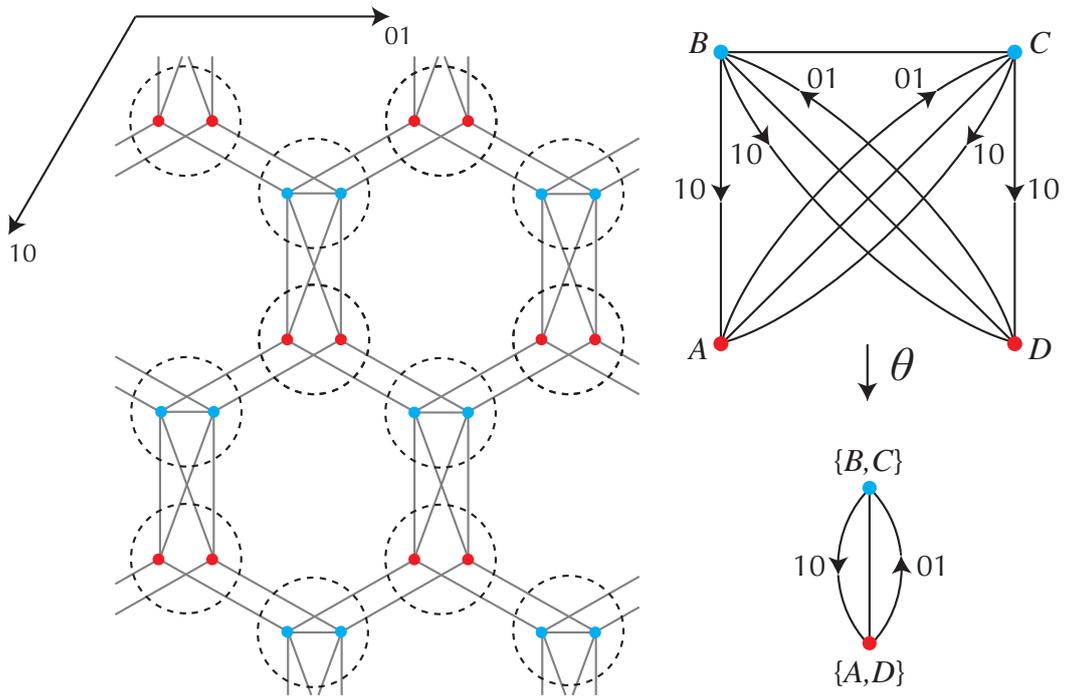


Figura 7.12: Uma rede periódica com um sistema de imprimitividade com blocos finitos, seu grafo de voltagem e o quociente por uma partição equivoltagem.

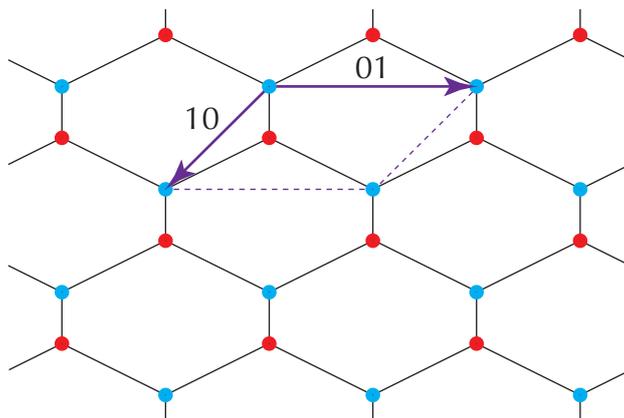


Figura 7.13: Uma representação periódica, baricêntrica do duplo hcb ; A aresta vertical (menor) tem peso 2.

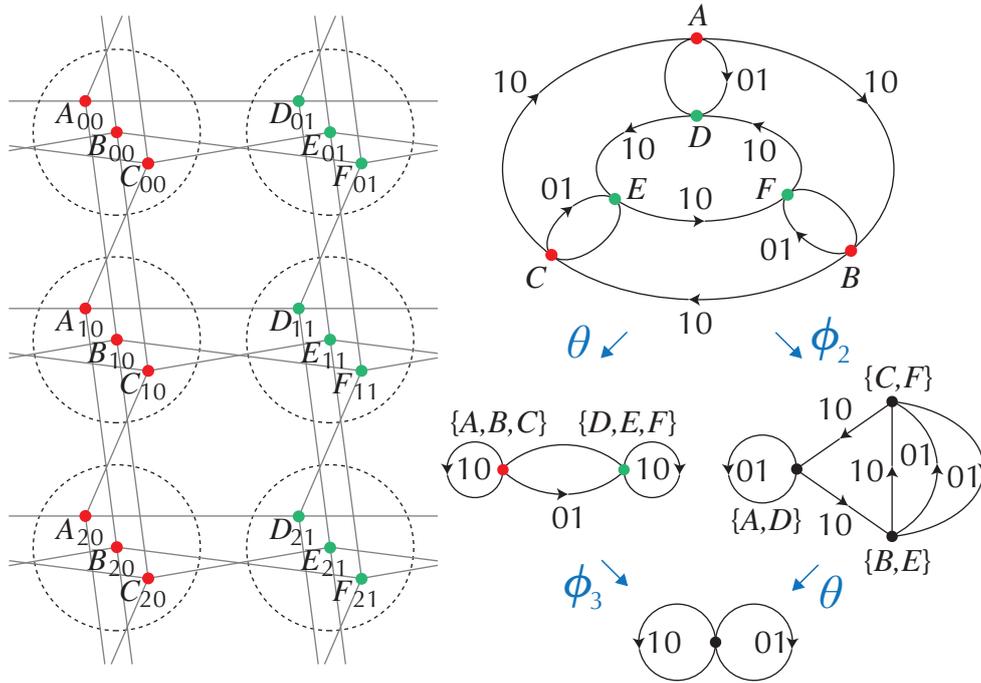


Figura 7.14: Uma rede NC com um sistema de imprimitividade, mas com um grupo de automorfismos limitados que atua livremente, seu grafo de voltagem e diferentes quocientes. θ indica o quociente pela partição equivoltagem, ϕ_i o quociente por um grupo de automorfismos.

Foi mostrado no Capítulo 6 que o grupo de automorfismos limitados da rede é um produto subdireto de \mathcal{S}_3 e \mathbb{Z}^2 com geradores $((12); (0, 1))$ e $((123), (1, 0))$. Além disso, como este grupo é transitivo e atua livremente sobre a rede, qualquer vértice pode ser indexado pelo automorfismo que leva a origem a ele, o que leva à seguinte correspondência (já vista na Seção 6.2.1):

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{ij} \rightarrow (e; (i, 2j)) \\ B_{ij} \rightarrow (123; (i, 2j)) \\ C_{ij} \rightarrow (132; (i, 2j)) \\ D_{ij} \rightarrow (12; (i, 2j - 1)) \\ E_{ij} \rightarrow (23; (i, 2j - 1)) \\ F_{ij} \rightarrow (13; (i, 2j - 1)) \end{array} \right.$$

Os automorfismos representativos da primeira família de blocos $\Delta_{ij} = (A_{ij}, B_{ij}, C_{ij})$ possuem permutações pares como primeiras coordenadas, enquanto a outra família $\Delta'_{ij} = (D_{ij}, E_{ij}, F_{ij})$ admite permutações ímpares como primeiras coordenadas. Para checar que σ é um sistema de imprimitividade, observa-se a ação de um automorfismo limitado arbitrário (p, t) sobre um bloco, ou seja: o resultado por multiplicação à esquerda dos três automorfismos representativos por (p, t) depende apenas da paridade da permutação p . Uma permutação par p estabiliza as duas famílias enquanto uma permutação ímpar troca as duas famílias. Por outro

lado, as segundas coordenadas (translacionais) idênticas em cada bloco permanecem assim depois de uma multiplicação por (p, t) . Conseqüentemente, qualquer automorfismo limitado leva um bloco num outro bloco; em particular, o subgrupo de ordem três gerado por $(123, (0, 0))$ estabiliza transitivamente cada bloco.

Como esperado, o grafo de voltagem apresenta uma partição equivoltagem com três vértices por célula. O respectivo quociente por esta partição é o grafo $K_2^{(2)}$ com um laço em cada vértice, do qual se pode derivar a rede **sql** com célula dupla. Em concordância com o Corolário 7.4.2, a representação baricêntrica periódica da rede NC apresenta colisões. Como há apenas arestas triplas entre dois blocos de imprimitividade ligados, ela é igual à representação baricêntrica da rede **sql**.

Vale a pena observar que o grafo de voltagem da rede apresenta um automorfismo, que pode ser chamado de ϕ_1 , no qual ambos os 3-ciclos interno e externo deslizam sobre si mesmos, e que preserva as voltagens de seus ciclos. O quociente por ϕ_1 e o quociente pela partição equivoltagem são isomorfos. Não é possível, entretanto, atribuir voltagens em \mathbb{Z}^2 aos laços do quociente pelo automorfismo pois esta voltagem, por exemplo, α , deveria verificar $\alpha^3 = 30$ com $\alpha \neq 10$. É importante enfatizar que o quociente por uma partição equivoltagem não descreve a rede, mas uma rede periódica associada à sua representação baricêntrica. Que a respectiva rede seja isomorfa à rede quadrada com célula unitária dupla é implicado pela existência do automorfismo ϕ_3 , trocando os dois vértices e levando ciclos em ciclos de mesma voltagem.

Além disso, partições equivoltagem podem existir mesmo na ausência de um automorfismo do grafo de voltagem, o que pode ser visto neste mesmo exemplo. Existe de fato outro automorfismo do grafo de voltagem da rede, por exemplo, ϕ_2 , que troca os 3-ciclos interno e externo e preserva as voltagens de cada ciclo. Este quociente por ϕ_2 pode ser rotulado, como mostrado na Figura 7.14, e é de fato o grafo de voltagem da rede associada ao grupo de translação maximal. Este grafo não admite automorfismos que preserva voltagens sobre seus ciclos, mas possui uma partição equivoltagem; os três vértices pertencem à mesma célula e o quociente por esta partição é o buquê B_2 com voltagens 10 e 01.

7.5.5 Uma rede periódica baseada no grafo de Frucht

É importante o fato de que a existência de uma partição equivoltagem no grafo de voltagem não é suficiente para assegurar que a rede derivada é não cristalográfica. A Figura 7.15 mostra um grafo de voltagem construído a partir do grafo de Frucht [36]. Este grafo com doze vértices é o menor grafo cúbico com grupo de automorfismo trivial; está representado em preto na figura e suas arestas possuem voltagem nula. Para cada voltagem 100, 010 e 001, foram adicionadas doze arestas de modo que

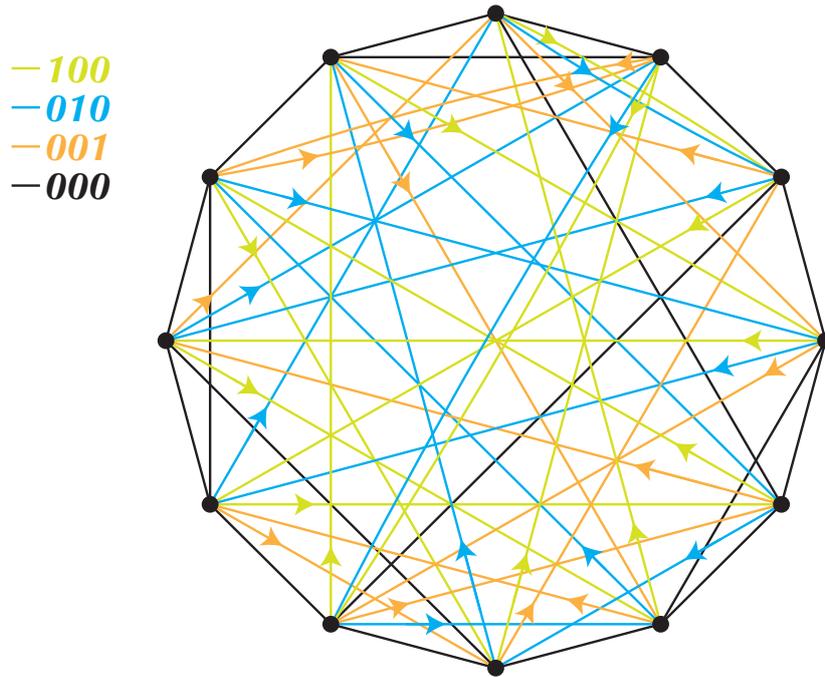


Figura 7.15: Um grafo de tensão baseado no grafo de Frucht (o grafo de Frucht está em preto); a cor da aresta simboliza a respectiva tensão.

em cada vértice entra e sai uma aresta de cada tensão. O grafo de tensão resultante é então regular de grau 9 e admite uma partição equitensão com célula única. O quociente por esta partição é o buquê com três laços com tensões 100, 010 e 001. Assim, a representação baricêntrica da rede derivada é igual à da rede **pcu**, o que já foi verificado usando a matriz ciclo-cociclo.

Através de cada vértice do grafo de tensão passam exatamente três ciclos de tensões $p00$, $0q0$ e $00r$ respectivamente, onde p , q e r são os tamanhos dos respectivos ciclos. Isto significa que cada um destes ciclos é projeção de uma geodésica forte da rede periódica derivada [29]. Além disso, toda aresta de tensão não nula pertence exatamente a um destes ciclos. Tais propriedades podem ser levantadas à rede periódica derivada. As arestas de tensão nula induzem em cada célula unitária da rede um grafo de Frucht; arestas coloridas levantam-se em geodésicas fortes que ligam as "células de Frucht" unitárias nas três direções 100, 010 e 001. Como automorfismos limitados levam geodésicas fortes em geodésicas fortes na mesma direção, as células de Frucht unitárias devem ser mapeadas em si mesmas. É claro que um grafo de Frucht só pode ser mapeado identicamente em outro grafo de Frucht, e como há exatamente uma geodésica forte passando por cada vértice da rede em cada uma das três direções, qualquer automorfismo limitado tem que ser uma translação, e com isso a rede derivada tem que ser cristalográfica. Conclui-se que a existência de um sistema não trivial de blocos finitos de imprimitividade está ligada à existência de automorfismos não triviais no subgrafo induzido pelo bloco.

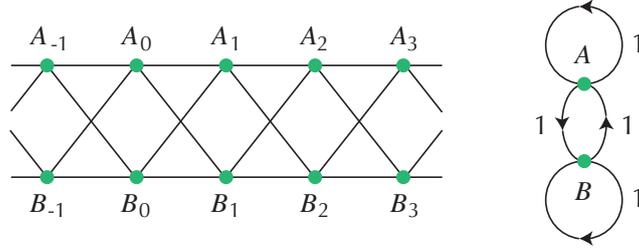


Figura 7.16: Uma rede NC transitiva com um sistema de imprimitividade e seu grafo de voltagem.

7.6 Grupos de Correlação

É sabido que grupos com uma ação imprimitiva podem ser mergulhados em um produto entrelaçado [12]. Antes de dar uma atenção maior a este conceito puramente de Teoria de Grupos, será analisada uma simples aplicação ao estudo de redes NC.

A Figura 7.16 mostra um grafo 1-periódico com um sistema de blocos finitos de imprimitividade $\Delta_i = \{A_i, B_i\}$. Este grafo admite como automorfismo limitado qualquer combinação $\phi_I = \prod_{i \in I} (A_i, B_i)$, onde I é qualquer subconjunto de inteiros, finito ou infinito. Note que para cada bloco Δ_i , os dois vértices podem ser permutados ou deixados invariantes. Assim, relativamente a um dado bloco, ϕ_I atua como uma permutação do grupo simétrico \mathcal{S}_2 . Este automorfismo pode ser então escrito como uma aplicação $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathcal{S}_2$ que atribui a cada bloco Δ_i a respectiva permutação. Um automorfismo limitado arbitrário é a combinação de tais ϕ_I com uma translação t e pode ser escrito como (t, f) , onde $t \in \mathbb{Z}$ e $f \in \mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}}$ são qualquer translação em \mathbb{Z} e qualquer aplicação de \mathbb{Z} em \mathcal{S}_2 , respectivamente. A lei de multiplicação é definida por:

$$\begin{cases} (t_2, f_2)(t_1, f_1) = (t_2 + t_1, f_2^{-t_1} f_1), \\ f^{-t}(n) = f(n + t). \end{cases}$$

Note que $\mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}}$ é provido de uma estrutura de grupo com o produto ponto-a-ponto $(fg)(n) = f(n)g(n) \in \mathcal{S}_2$. O novo grupo é chamado produto entrelaçado de \mathbb{Z} por \mathcal{S}_2 , e é na verdade o produto semidireto de \mathbb{Z} por $\mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}}$; este grupo é denotado por $\mathbb{Z} \text{ Wr } \mathcal{S}_2$.

Embora a definição de produto entrelaçado não mostre tal restrição, serão necessários apenas os produtos $\mathbb{Z}^p \text{ Wr } \mathcal{S}_n$ para mergulhar o grupo dos automorfismos limitados de uma rede p -periódica admitindo um sistema de blocos de imprimitividade com n vértices por bloco. Neste caso, a definição formal é como acima: os elementos do produto entrelaçado são escritos (t, f) , com $t \in \mathbb{Z}^p$ e $f \in \mathcal{S}_n^{\mathbb{Z}^p}$ são qualquer translação em \mathbb{Z}^p e qualquer aplicação de \mathbb{Z}^p em \mathcal{S}_n , respectivamente. A lei de multiplicação é dada pela mesma fórmula acima.

Entretanto, nem todas as redes periódicas são transitivas. Neste caso, tem que ser considerada separadamente a ação de automorfismos limitados em cada órbita, gerando o respectivo mergulho em algum produto entrelaçado, e então construir o grupo inteiro como produto subdireto de tais produtos entrelaçados [12].

Alguns grafos periódicos são bem simples; o grafo periódico da Figura 7.5, por exemplo, apresenta dois tipos de blocos de imprimitividade, mas aplicações de \mathbb{Z} em \mathcal{S}_1 associadas aos blocos $\{A_i\}$ são triviais, de modo que o grupo de automorfismos limitados é isomorfo ao produto entrelaçado $\mathbb{Z} \text{ Wr } \mathcal{S}_2$, descrevendo o comportamento somente dos blocos $\{B_i, C_i\}$. Outros grupos são surpreendentemente mais simples; somente três aplicações $f \in \mathcal{S}_3^{\mathbb{Z}^2}$ são necessárias para que seja descrito o grupo de automorfismos limitados do triplo **hcb**. Tais aplicações são chamadas de aplicações *constantes* e levam qualquer translação em \mathbb{Z}^2 a uma dada permutação no grupo gerado pelo 3-ciclo $(1, 2, 3)$. A fim de entender a origem desta diversidade de grupos de automorfismos limitados, introduz-se o conceito de *grupos de correlação*, que são construídos a partir do quociente Q do grafo de voltagem N/\mathcal{T} pela partição equivoltagem.

Uma família inteira de grupos de correlação \mathcal{C}_t^e para $t \in \mathcal{T}$ está associada a cada aresta e de Q como a seguir. Seja $e = UV$ uma aresta de Q com voltagem r ; U e V representam duas (não necessariamente diferentes) células da partição equivoltagem em N/\mathcal{T} que são ligadas por todas as arestas na pré-imagem de e com a mesma voltagem r . Levantando tais células até a rede periódica, há dois blocos de imprimitividade, por exemplo, U_t e V_{t+r} , para todo $t \in \mathcal{T}$ que estão ligados por arestas na pré-imagem de e . Considera-se então o subgrafo de N/\mathcal{T} induzido pela união dos vértices nos blocos U_t e V_{t+r} , ou seja: o conjunto de arestas contém todas as arestas na pré-imagem de e , bem como nas pré-imagens das arestas com voltagem zero dentro das células U e V , respectivamente. As últimas claramente ligam vértices num mesmo bloco U_t ou V_{t+r} . Entre os automorfismos deste grafo, consideram-se apenas aqueles que estabilizam os dois blocos, formando o grupo de correlação \mathcal{C}_t^e escritos como (p_U, p_V) , uma vez que eles podem ser mergulhados no produto direto dos dois grupos de automorfismos \mathcal{C}_U e \mathcal{C}_V dos grafos obtidos das células U e V em N/\mathcal{T} por inclusão de arestas com voltagem nula.

Definição 7.6.1. *A correlação entre os blocos de um sistema de imprimitividade σ numa rede (N, \mathcal{T}) é dita uma **correlação completa** quando uma permutação de vértices em apenas um bloco induz uma permutação de vértices em todos os demais blocos de σ . Por outro lado, diz-se que há **ausência de correlação** entre os blocos de imprimitividade de σ quando as permutações de vértices dos blocos configuram automorfismos que fixam os vértices de todos os demais blocos da rede.*

Serão consideradas agora aplicações de grupos de correlação.

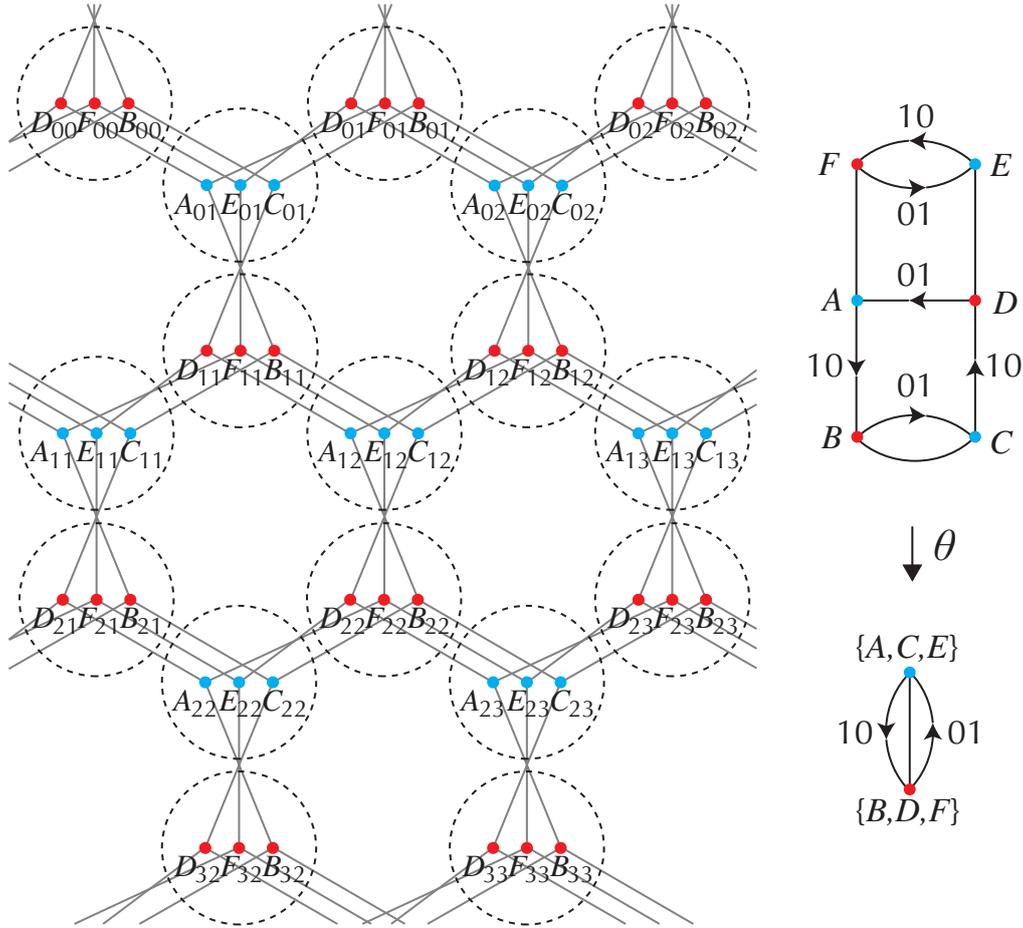


Figura 7.17: Representação pseudo hexagonal do triplo **hcb**, uma rede NC com um sistema de imprimitividade admitindo um grupo de automorfismos limitados que atua livremente, seu grafo de voltagem e o quociente por uma partição equivoltagem.

7.6.1 Um triplo **hcb**

A Figura 7.17 mostra um triplo **hcb**, outra rede NC descrita no Capítulo 6. Por construção, o grupo de automorfismos limitados atua livremente na rede. O grafo de voltagem apresenta uma partição equivoltagem cujo quociente Q é isomorfo a $K_2^{(3)}$.

Como o quociente Q possui três arestas, há três famílias de grupos de correlação. Obtêm-se os grupos de correlação associados à aresta com voltagem 10 (observe a Figura 7.18(a)) deletando em N/\mathcal{T} todas as arestas com voltagens 01 e 00, uma vez que as últimas ligam vértices em células diferentes da partição e tomando o automorfismo que preserva as duas células. Neste caso, o subgrafo induzido na rede periódica contém as três arestas $A_t B_{t+10}$, $C_t D_{t+10}$ e $E_t F_{t+10}$; conseqüentemente, para qualquer permutação no subconjunto de vértices $\{A_t, C_t, E_t\}$ existe exatamente uma permutação no subconjunto de vértices $\{B_{t+10}, D_{t+10}, F_{t+10}\}$. Como ambos os grupos de permutação $\mathcal{S}_{\{A_t, C_t, E_t\}}$ e $\mathcal{S}_{\{B_{t+10}, D_{t+10}, F_{t+10}\}}$ são isomorfos, o grupo de correlação é o subgrupo *diagonal* de $\mathcal{S}_{\{A_t, C_t, E_t\}} \times \mathcal{S}_{\{B_{t+10}, D_{t+10}, F_{t+10}\}}$ contendo apenas

permutações $(p, \theta.p.\theta^{-1})$ para qualquer $p \in \mathcal{S}_{\{A_t, C_t, E_t\}}$, onde θ é a aplicação induzida pelas arestas:

$$\begin{cases} \theta(A_t) = B_{t+10} \\ \theta(C_t) = D_{t+10} \\ \theta(E_t) = F_{t+10} \end{cases}$$

O mesmo argumento é válido para as outras duas arestas de Q , do que se conclui que há uma correlação completa entre permutações possíveis entre blocos de imprimitividade ligados. De fato, se o conjunto de vértices é permutado em qualquer bloco por p , a mesma permutação, a menos do respectivo isomorfismo, deve ocorrer em cada bloco. Isto leva ao valor seis para uma cota superior para a ordem do subgrupo estabilizador \mathcal{B}_σ .

É, entretanto, necessário checar a consistência destas correlações na rede inteira. Dada uma permutação inicial em algum bloco, a permutação induzida em qualquer bloco não deve depender do caminho escolhido para alcançá-lo. Equivalentemente, correlações devem ser consistentes sobre anéis fortes na rede associada à representação baricêntrica. Neste caso, θ é uma permutação no bloco escolhido como origem do anel e induzido pela sequência de arestas ao longo deste anel, isto é: correlaciona-se a permutação num bloco consigo mesma através da equação $(p, \theta.p.\theta^{-1})$. Para o triplo **hcb**, o único anel forte é levantado a partir do 6-ciclo em Q percorrendo sucessivamente as arestas com voltagens 10, 01, 00, $\bar{1}0$, $0\bar{1}$ e 00 (observe a Figura 7.18(b)). Pode ser verificado que a aplicação correspondente é dada por:

$$\begin{cases} \theta(A_t) = E_t \\ \theta(E_t) = C_t \\ \theta(C_t) = A_t \end{cases},$$

e as únicas permutações que são auto-conjugadas por θ são aquelas no grupo cíclico gerado pela permutação (A_t, C_t, E_t) . Assim, há correlação completa entre os blocos, e na rede inteira há somente três automorfismos limitados diferentes de translação.

7.6.2 Grades 1-periódicas

O grafos 1-periódicos mostrados na Figura 7.19 partes (a) e (b) apresentam dois tipos de blocos de imprimitividade: em (a) os blocos possuem 1 e 2 vértices, e em (b) possuem 1 e 4 vértices, respectivamente; os grafos 1-periódicos das partes (c) e (d) possuem um único tipo de bloco com 2 vértices. Os subgrafos induzidos nos grafos periódicos por uma aresta em seus quocientes Q (um laço simples com

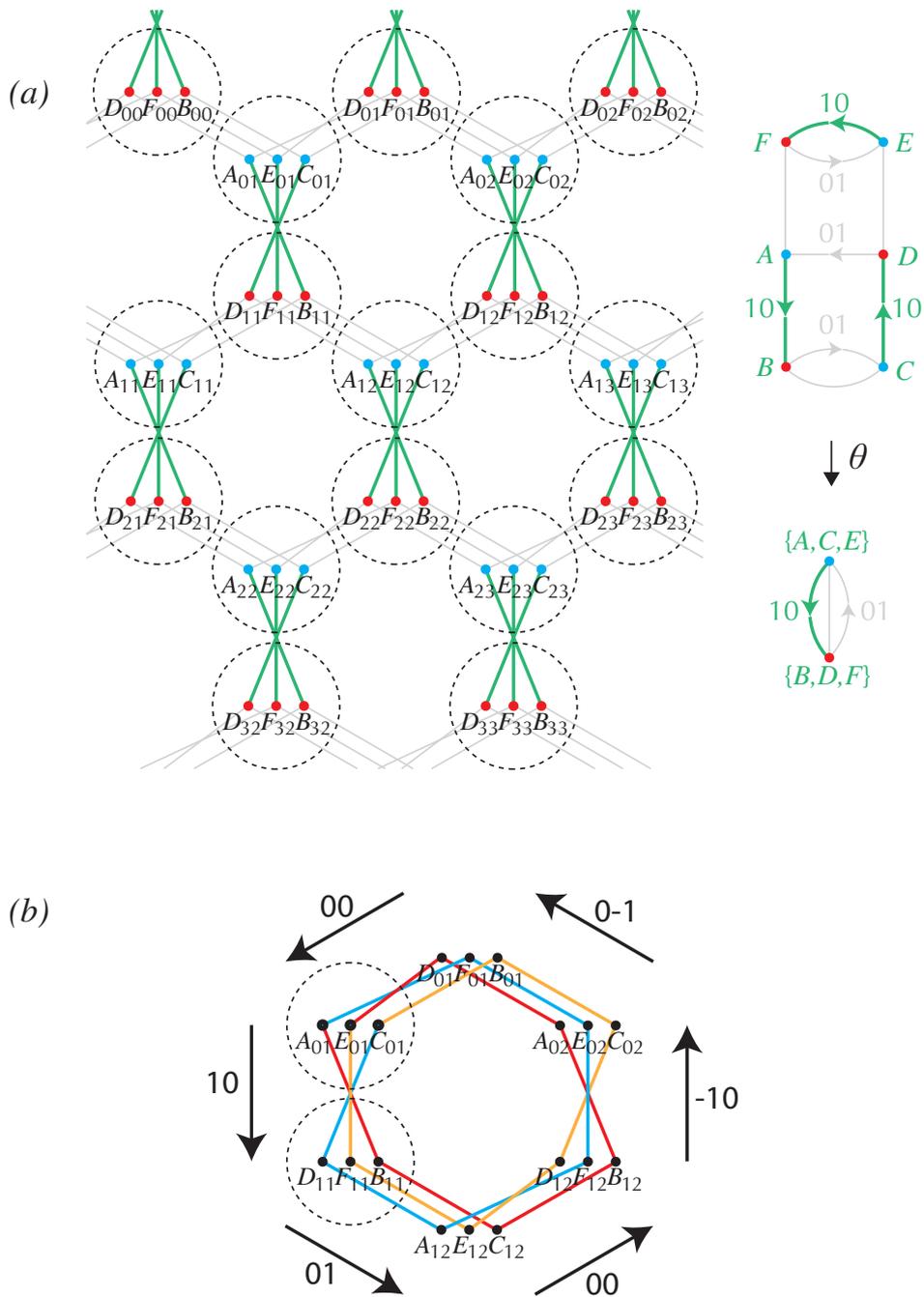


Figura 7.18: Destacada em verde na parte (a) a aresta com voltagem 10 no quociente pela partição Q , bem como as arestas com voltagem 10 em N/\mathcal{T} , e também todas as arestas derivadas $A_t B_{t+10}$, $C_t D_{t+10}$ e $E_t F_{t+10}$ na rede periódica. Em (b), pode-se observar a consistência das correlações através do anel forte levantado a partir do 6-ciclo em Q percorrendo as arestas com voltagens 10, 01, 00, $\bar{1}0$, $0\bar{1}$ e 00.

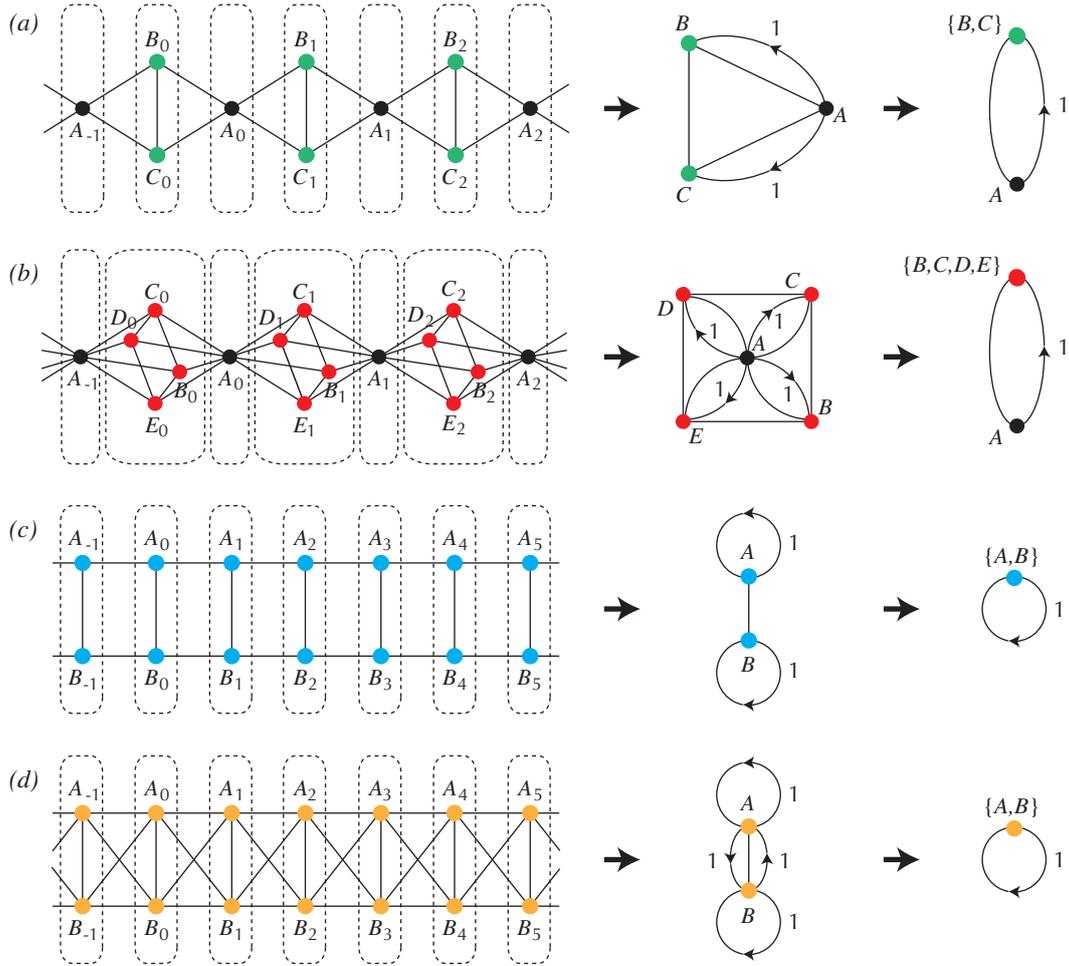


Figura 7.19: Grafos 1-periódicos com sistema de imprimitividade apresentando ausência de correlações em (a), (b) e (d), mas correlação completa em (c): a permutação dos vértices A_0 e B_0 implica a permutação de todos os infinitos A_i e B_i , $i \in \mathbb{N}$.

voltagem 1) são isomorfos a $K_{1,2}$ (a), $K_{1,4}$ (b), $K_2 \cup K_2$ (c) e $K_{2,2}$ (d), e os grupos de correlação associados são isomorfos aos produtos $\mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_2$ (a), $\mathcal{S}_1 \times \mathcal{S}_4$ (b) e $\mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$ (d). Em (c) há somente uma possibilidade de automorfismo limitado não trivial, pois o grupo de correlação é isomorfo ao grupo diagonal de $\mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$. Isto indica correlação completa em (c) e ausência de correlações em (a), (b) e (d): os blocos são completamente independentes de seus vizinhos e os grupos de automorfismos limitados são isomorfos a produtos entrelaçados.

7.6.3 O duplo hcb

Os exemplos nas duas subseções anteriores correspondem a situações extremas. Um caso intermediário pode ser visto no duplo **hcb** (Figura 7.12 e Figura 7.20). Há dois blocos de imprimitividade, um com a aresta BC , o outro com dois vértices independentes A e D . Há também dois subgrafos não isomorfos induzidos na rede periódica

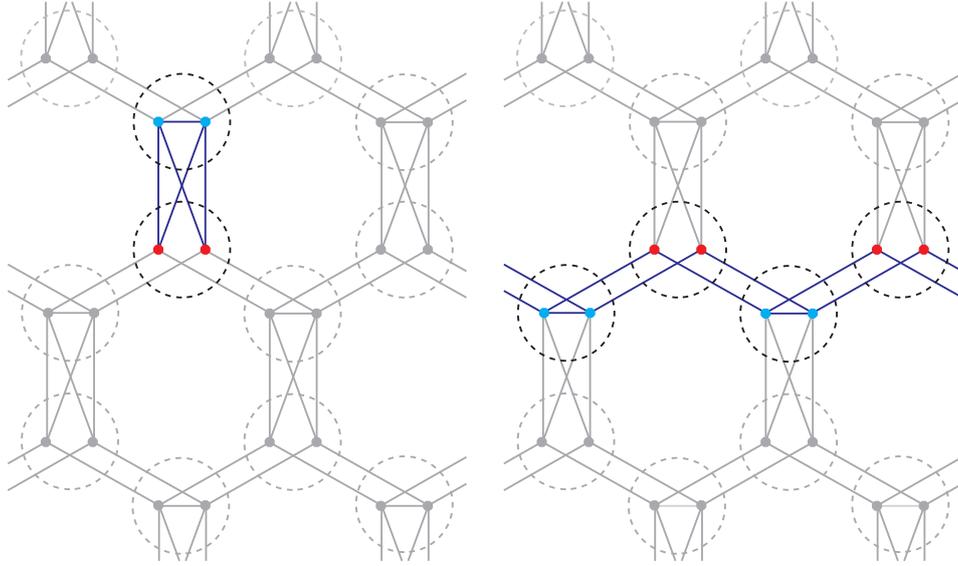


Figura 7.20: Observe que à esquerda está em destaque a ausência de correlação entre os blocos; à direita, correlação forte entre os blocos, que se propaga infinitamente na direção horizontal.

por uma aresta em Q . Os subgrafos induzidos pelas arestas com voltagens 00 e 01 contêm duas arestas independentes, a saber, AC e BD , enquanto aquele induzido pela aresta com voltagem 10 contém $K_{2,2}$. Consequentemente há correlações completas para os primeiros e nenhuma correlação para o último. Como resultado, uma permutação em qualquer bloco vai necessariamente propagar-se ao longo da direção 01. Neste caso, o grupo de automorfismos limitados é dado pelo produto semidireto de \mathbb{Z}^2 por $\mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}}$.

7.7 Algoritmo

As considerações anteriores levam à definição de um algoritmo para a análise da natureza do subgrupo \mathcal{B}_σ , e a partir deste o grupo de automorfismos limitados \mathcal{B} , diretamente do grafo quociente N/\mathcal{T} . Este algoritmo deve ser aplicado quando há alguma suspeita de que a rede periódica pode ser não cristalográfica; por exemplo, quando o programa Systre [37] dá mensagem de erro devido à existência de colisões na representação baricêntrica.

- Dada uma rede periódica (N, \mathcal{T}) definida através de um grafo de voltagem, pode-se determinar sua representação baricêntrica usando o método da matriz ciclo-cociclo [4].
- Se necessário, uma origem comum deve ser escolhida para todos os vértices-retículos que colidem e o grafo quociente redesenhado, colocando em evidência a partição equivoltagem.

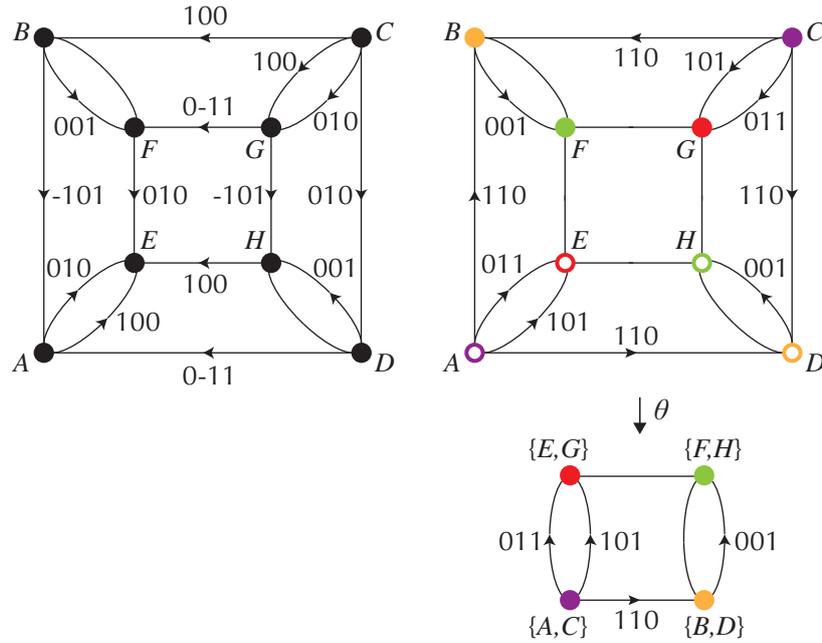


Figura 7.21: À esquerda superior, o grafo de voltagem de $4/4/o19$ (veja o texto). À direita superior, o grafo de voltagem obtido depois de mudanças de origem em vértice-retículos evidenciando uma partição equivoltagem. Embaixo, o respectivo quociente.

- Grupos de Correlação devem então ser analisados para toda aresta do quociente Q de N/\mathcal{T} pela partição equivoltagem, levando à estrutura do grupo de automorfismos limitados.

Deve ainda ser lembrado que algumas redes cristalográficas realmente apresentam colisões. Neste caso, é esperado que o grafo de voltagem não apresente partição equivoltagem após a primeira etapa do algoritmo, ou quando apresenta, que os grupos de correlação sejam reduzidos trivialmente à identidade, como foi visto no caso da rede derivada do grafo de Frucht.

7.8 Aplicação: Três Empacotamentos Esféricos Ortorrômnicos

Num artigo recente, Sowa [33] listou novos empacotamentos esféricos com simetria ortorrômbrica. Entre as redes periódicas correspondentes, três apresentam colisões e não podem ser estudadas pelo Systre; elas são $4/4/o18$, $4/4/o19$ e $5/3/o6$. A segunda será analisada em maior detalhe.

7.8.1 4/4/o19

A Figura 7.21 apresenta o grafo de voltagem da rede periódica associada ao empacotamento esférico 4/4/o19, conforme extraída pelo programa TOPOS [38] a partir das informações de Sowa. Ao aplicar o método da matriz ciclo-cociclo para obter um mergulho baricêntrico desta rede, são verificadas as colisões de vértice-retículos aos pares: $\{A, C\}$, $\{B, D\}$, $\{E, G\}$ e $\{F, H\}$. Dois vértices no mesmo par foram marcados com a mesma cor no quociente da direita nesta figura, um como um círculo e o outro como um disco. Mudanças da origem nos diferentes vértice-retículos são necessárias para se conseguir uma origem comum para vértices no mesmo bloco e levam ao grafo de voltagem como apresentado na Figura 7.22. Este grafo claramente possui uma partição equivoltagem com quociente dado na parte inferior da figura. Este quociente é conhecido como o grafo quociente da rede minimal **ths** [27], o que leva à representação da rede como uma dupla **ths**, conforme a Figura 7.22.

Assim como no caso do duplo **hcb** existem dois subgrafos não isomorfos induzidos na rede periódica por uma aresta no quociente Q . Os subgrafos induzidos pelas arestas duplas de Q contêm duas arestas independentes, enquanto aqueles induzidos pelas arestas simples contêm $K_{2,2}$. Consequentemente, há fortes correlações para os primeiros, e nenhuma correlação para os últimos. Assim, permutações de dois vértices num bloco devem apenas propagar-se ao longo do subgrafo 1-periódico que percorre a direção associada à respectiva aresta dupla em Q . Como permutações nas direções ortogonais associadas às duas arestas duplas em Q comportam-se de forma independente, o grupo dos automorfismos limitados é isomorfo ao produto semidireto de \mathbb{Z}^3 e $\mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}^2} \times \mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}^2}$, que pode ser mergulhado no produto entrelaçado $\mathbb{Z}^3 \text{Wr } \mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$.

7.8.2 4/4/o18 e 5/3/o6

A análise destas duas redes é similar à análise anterior, de maneira que apresentam-se os respectivos grafos quociente na Figura 7.23(a) e (c), com a rede periódica correspondente a 4/4/o18 em (b). Os dois grafos de voltagem apresentam partição equivoltagem com dois vértices por célula e, além disso, o quociente por esta partição é novamente isomorfo ao grafo quociente de **ths**, o que implica que ambas as redes podem ser construídas como um duplo **ths**. No entanto, todas as correlações são completas no caso 4/4/o18, e então o subgrupo estabilizador \mathcal{B}_σ é isomorfo a \mathcal{S}_2 e o grupo de automorfismos limitados é isomorfo ao produto direto $\mathbb{Z}^3 \times \mathcal{S}_2$. O caso 5/3/o6 é idêntico ao caso 4/4/o19 com a pequena diferença de que vértices no mesmo bloco são ligados um ao outro. Assim, os três empacotamentos esféricos estão associados a redes NC.

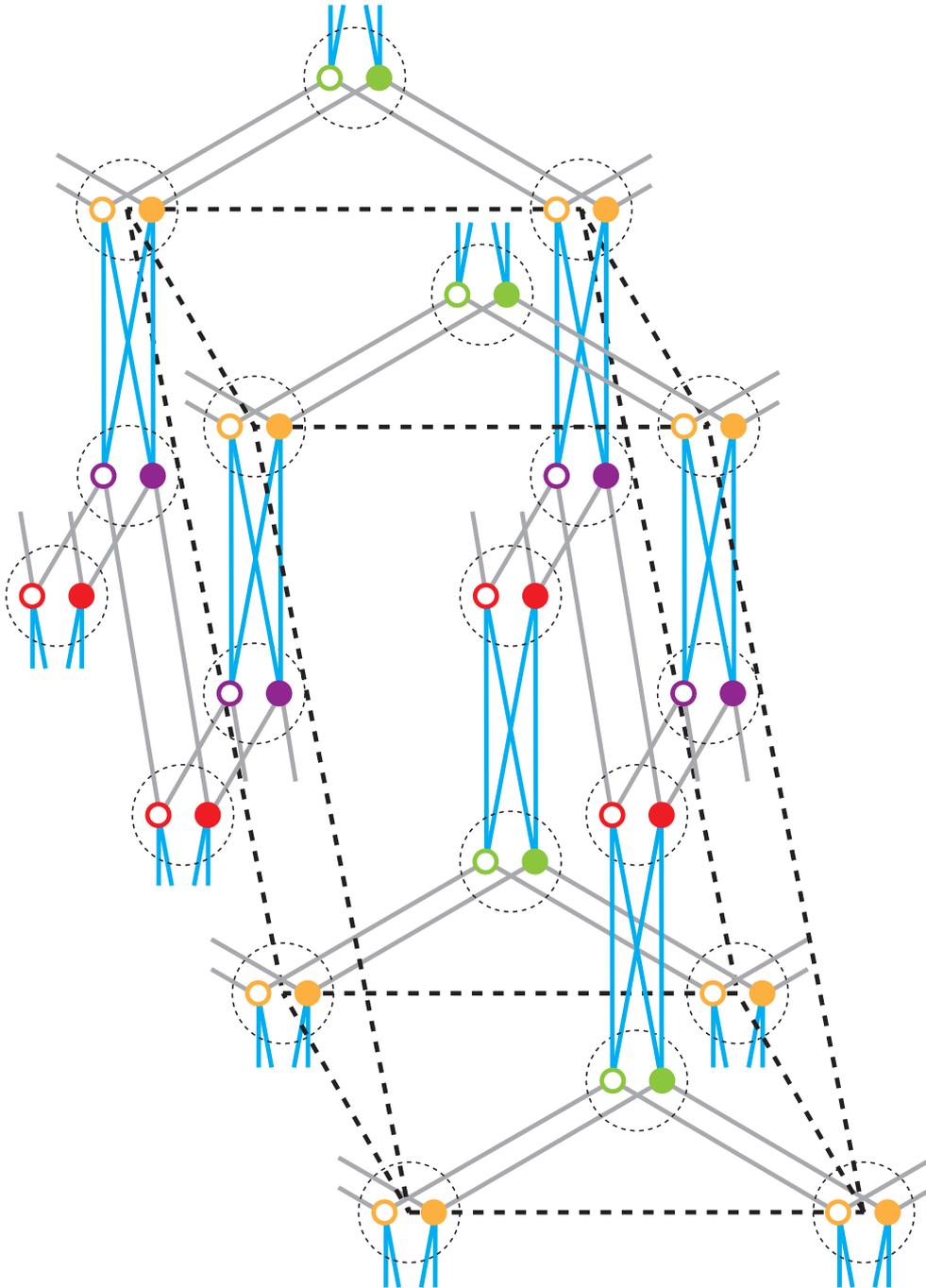


Figura 7.22: Representação da rede $4/4/o19$ como uma dupla **ths**. Note que uma célula primitiva está descrita. Vértices são agrupados em blocos usando as mesmas cores que foram usadas no grafo quociente; arestas levantadas das arestas simples em Q e formando um subgrafo isomorfo a $K_{2,2}$ são mostrados em azul, evidenciando a falta de correlações entre subgrafos cinza 1-periódicos.

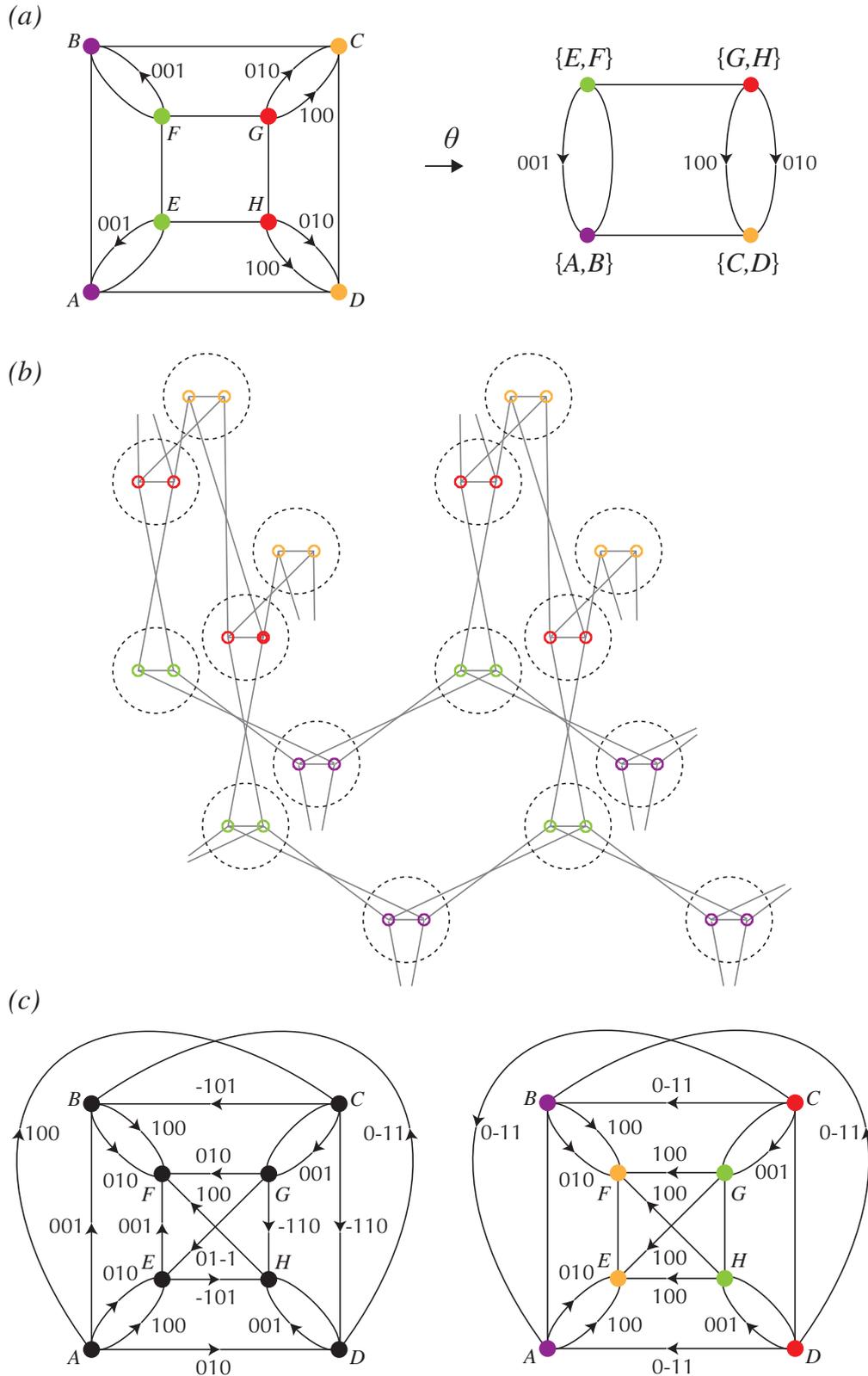


Figura 7.23: Em (a), o grafo de voltagem de $4/4/o18$ já apresenta uma partição equivoltagem com quociente isomorfo ao quociente de **ths**. Em (b), a rede periódica correspondente a $4/4/o18$; observe a correlação completa. Em (c), o grafo de voltagem de $5/3/o6$ tem que ser refeito com mudança de origens para evidenciar um grafo com partição equivoltagem.

7.9 Considerações Adicionais

Neste capítulo demonstrou-se que toda rede NC que admite um sistema de imprimitividade com blocos finitos para o grupo dos automorfismos limitados apresenta colisões de vértices em sua representação baricêntrica. Além disso, redes NC possuindo tal característica admitem grafo quociente com partição equivoltagem desde que sejam escolhidas origens para os retículos adequadamente. Uma ferramenta mais eficaz do que os blocos de imprimitividade numa rede NC, porém, são os automorfismos limitados de ordem finita. O próximo capítulo finaliza a questão, demonstrando que toda rede NC apresenta automorfismos limitados de ordem finita, os quais formam um subgrupo de \mathcal{B} . Neste caso, será visto que a rede admite sempre um sistema de imprimitividade com blocos finitos para o grupo dos automorfismos limitados.

Capítulo 8

Caracterização de Redes NC

8.1 Introdução

Foi observado no capítulo anterior que uma rede periódica (N, \mathcal{T}) que possui um sistema de imprimitividade com blocos finitos para o grupo $\mathcal{B}(N)$ dos automorfismos limitados possui duas propriedades importantes:

- (a) Apresenta colisões de vértices em qualquer representação baricêntrica.
- (b) Para uma escolha adequada de origens nos vértice-retículos, o grafo quociente admite uma partição equivoltagem.

Durante o trabalho realizado em [7], [8] e [39], observou-se que tais propriedades se estendem a todas as redes NC, uma vez que todas as redes NC conhecidas possuem um sistema de imprimitividade com blocos finitos para o grupo dos automorfismos limitados. A chave para a demonstração deste resultado é o completo entendimento de um importante subconjunto de $\mathcal{B}(N)$: o conjunto dos automorfismos limitados de ordem finita $\mathcal{F}(N)$. Uma vez demonstrado que $\mathcal{F}(N)$ é estável, é fácil concluir que ele na verdade é não apenas um subgrupo de $\mathcal{B}(N)$, mas um subgrupo normal de $\mathcal{B}(N)$; isto, por sua vez, permite a construção de uma partição específica do conjunto de vértices em blocos finitos de imprimitividade através das órbitas de $\mathcal{F}(N)$.

O caminho para a demonstração deste resultado, no entanto, apresenta muitas dificuldades e exige a adaptação de antigas ferramentas e a introdução de novas ferramentas. A estabilidade de $\mathcal{F}(N)$ possui papel central neste caminho; tal propriedade é obtida através de uma demonstração por indução, cujo primeiro passo (Seção 8.4) é demonstrado com a utilização do conceito de convergência de permutações (Apêndice A), e cujo passo indutivo é demonstrado utilizando-se resultados relativos a grafos fibra, um conceito novo (Seção 8.5) fortemente relacionado com fibras geodésicas.

A partir da demonstração de que $\mathcal{F}(N)$ é subgrupo normal de $\mathcal{B}(N)$ obtém-se o Teorema Fundamental das Redes Não Cristalográficas (Seção 8.6), que finalmente conclui com a generalização das propriedades (a) e (b) a todas as redes NC.

8.2 Redes Reticulares

Redes periódicas com um único vértice-retículo são chamadas de *redes reticulares* [40]. Seus grafos quociente contêm um único vértice e alguns laços, pelo menos tantos quantos for a periodicidade p da rede. É claro que dois laços não podem ter a mesma voltagem, mas nenhuma restrição adicional é imposta. Descreve-se aqui uma importante propriedade de tais redes:

Teorema 8.2.1. *Redes reticulares são redes cristalográficas.*

Demonstração. Seja (N, \mathcal{T}) uma rede reticular p -periódica. Devido à restrição sobre as voltagens em N/\mathcal{T} , o grafo quociente de qualquer fibra geodésica de N deve ser um laço. A partir da propriedade P_1 da Seção 4.3, sabe-se que há pelo menos p laços com voltagens independentes correspondendo a fibras geodésicas. Seja $\mathcal{S} < \mathcal{T}$ o subgrupo gerado por este conjunto de voltagens: o índice de \mathcal{S} em \mathcal{T} é claramente finito. Suponha agora que exista um automorfismo limitado não trivial b mapeando o vértice U em $t(U)$. Então $f = t^{-1}b$ é um automorfismo limitado não trivial que possui U como um vértice fixo. Pela propriedade P_3 da Seção 4.3, todas as fibras geodésicas atravessando U são também fixadas, e assim todo o subretículo $\mathcal{S}(U)$ é fixado por f . De acordo com o Corolário 7.4.1, qualquer representação baricêntrica periódica de (N, \mathcal{T}) , que também é uma representação baricêntrica de (N, \mathcal{S}) , com vértice-lattice $\mathcal{S}(U)$ fixado, apresenta colisões. Isto não pode acontecer, pois N contém um único vértice-retículo. Então $b = t$. \square

8.3 Grafos Fibra

Considere uma rede p -periódica (N, \mathcal{T}) e suas fibras geodésicas ao longo da direção $\langle t \rangle \in \mathcal{T}$. Será construída agora uma rede $(p-1)$ -periódica a partir de um conjunto de fibras geodésicas da rede p -periódica (N, \mathcal{T}) .

Definição 8.3.1. *O conjunto de vértices de um **grafo fibra** consiste na família de todas as fibras geodésicas ao longo de $\langle t \rangle$ que são equivalentes pelo grupo de automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$.*

Seja V_t o conjunto de vértices de um grafo fibra de acordo com a definição. Pode-se claramente definir a distância $d_G(F_1, F_2)$ na rede N entre duas fibras geodésicas F_1 e F_2 pertencendo a V_t como o comprimento de um menor caminho ligando as

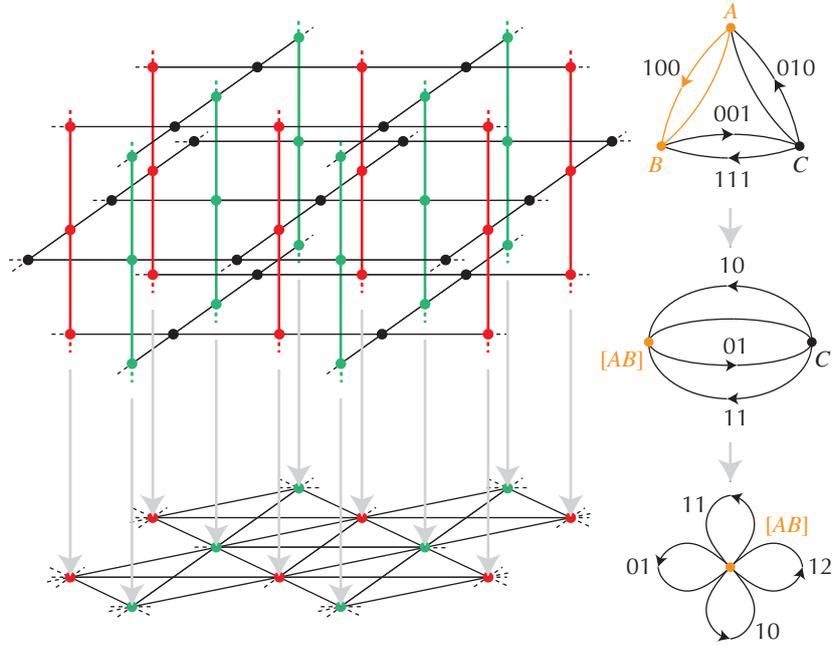


Figura 8.1: Uma representação da rede **nbo** (grafo quociente $K_3^{(2)}$) com fibras ao longo da direção 100; as fibras coloridas (vermelhas e verdes) da rede 3-periódica formam o conjunto de vértices de uma rede regular 2-periódica de grau 8, apresentada como uma projeção (grafo quociente: B_4).

duas fibras. Dado qualquer inteiro positivo n , define-se o grafo \mathfrak{F}_n sobre V_t de modo que duas fibras F_1 e F_2 em V_t são adjacentes em \mathfrak{F}_n se $d_G(F_1, F_2) \leq n$. O *grafo fibra* é definido como o grafo $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}_c$, onde c é o menor valor de n que produz um grafo conexo. Note que a periodicidade de N garante a existência de c .

Alguns exemplos ilustrarão estes conceitos. A Figura 8.1 mostra a rede **nbo** e seu grafo de voltagem $K_3^{(2)}$. Fibras geodésicas ao longo da direção 100 são caminhos infinitos, indicados em verde e vermelho para maior destaque, embora sejam todas equivalentes por translação. Em concordância com a propriedade P_2 da Seção 4.3, o grafo quociente F/\mathcal{S} de tais fibras é o 2-ciclo de voltagem 100, destacado em amarelo em $K_3^{(2)}$. Pode ser observado na figura que a distância mínima entre duas fibras é igual a 2, e que cada fibra possui 8 vizinhos a esta distância, levando à rede fibra 2-periódica mostrada como projeção da rede **nbo**. Neste caso, o seguinte procedimento de 2 passos pode ser utilizado para chegar ao grafo de voltagem do grafo fibra diretamente do quociente da rede **nbo**. Primeiramente, o subgrafo F/\mathcal{S} é condensado num único vértice (amarelo), levando ao novo grafo $K_2^{(4)}$, e as voltagens são substituídas por suas projeções no grupo quociente \mathcal{T}/\mathcal{S} : aqui deve-se apenas apagar a primeira coordenada da voltagem original. No último passo, somente o vértice fibra é mantido e os laços são inseridos, um para cada 2-ciclo de $K_2^{(4)}$. A voltagem sobre o laço é a mesma que a voltagem sobre o respectivo 2-ciclo, com a condição de que dois laços não podem ter a mesma voltagem, ou voltagens opostas.

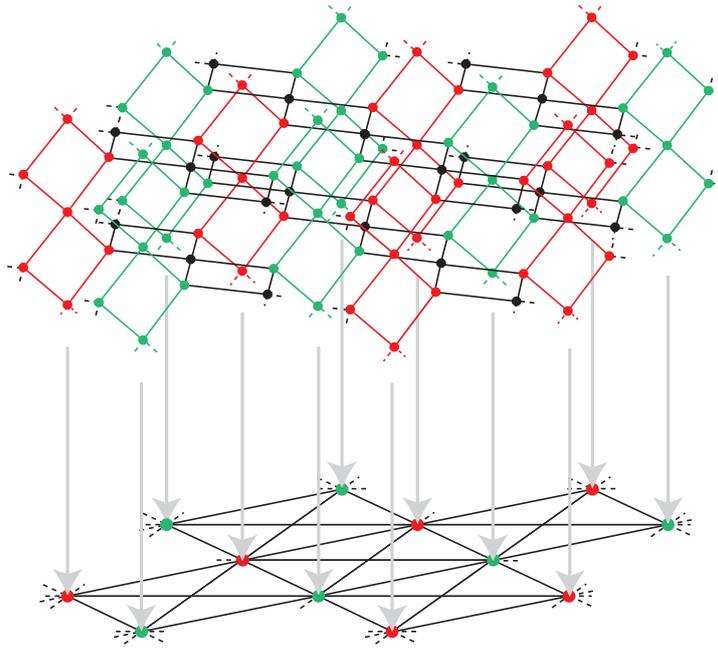


Figura 8.2: Uma representação da rede **pts** com fibras ao longo da direção 100; as fibras coloridas (vermelhas e verdes) da rede 3-periódica formam o conjunto de vértices de uma rede regular 2-periódica de grau 8.

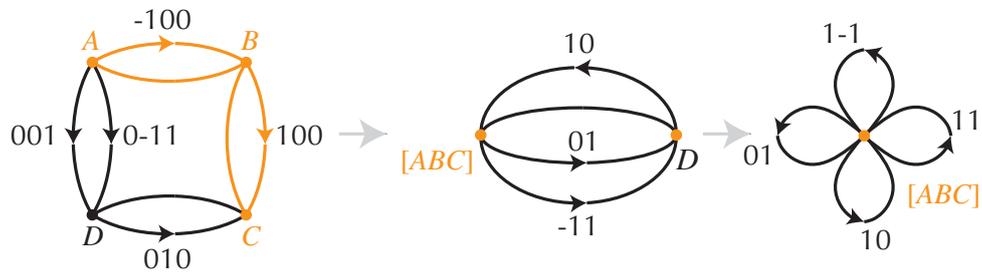


Figura 8.3: Passos de redução do (esquerda) grafo de tensão da rede **pts** ($C_4^{(2)}$) com o grafo de tensão da fibra ao longo de 100 marcado em amarelo ao (direita) grafo de tensão do grafo fibra (B_4).

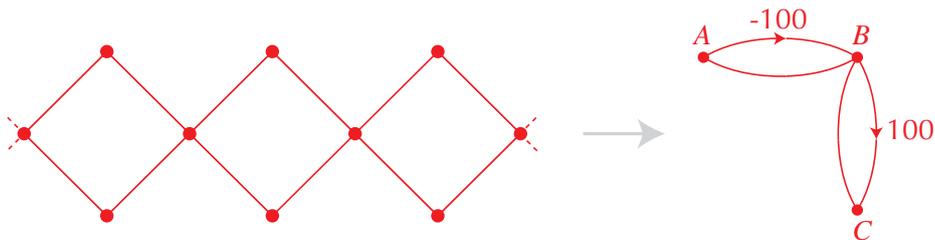


Figura 8.4: Uma fibra geodésica da rede **pts** ao longo de 100 e seu grafo de tensão.

A Figura 8.2 mostra a rede **pts**, com grafo quociente $C_4^{(2)}$ mostrado na Figura 8.3 à esquerda. Em contraste com **nbo**, as fibras geodésicas não são degeneradas em caminhos infinitos. Para maior clareza, a Figura 8.4 mostra uma única fibra de **pts** ao longo da direção 100 e seu grafo quociente, também destacado em amarelo como subgrafo de $C_4^{(2)}$ na Figura 8.3. Assim como na **nbo**, cada fibra está a uma distância igual a 2 de 8 fibras equivalentes, e com isso ambas as redes fibra de **nbo** e **pts** ao longo da direção 100 são isomorfas. Note que o isomorfismo já é evidente depois do segundo passo de redução dos respectivos grafos de voltagem. De fato, o mesmo $K_2^{(4)}$ é obtido em ambos os casos, e as voltagens se tornam iguais se uma nova base $(1\bar{1}, \bar{1}0)$ é usada para **pts**.

Considera-se finalmente a rede NC associada ao empacotamento esférico $4/4/o19$, já visto na Seção 7.8, desenhado na Figura 8.5 como uma representação pseudo-baricêntrica (vértices que colidem são circulados aos pares). Fibras geodésicas ao longo de 001 são caminhos infinitos e existem duas fibras translacionalmente não equivalentes com grafo de voltagem destacado em amarelo na Figura 8.6. Cada fibra está a uma distância igual a 2 da fibra que colide, e a uma distância igual a 3 de oito fibras divididas em quatro pares que colidem. O grafo fibra $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}_3$ mostrado como uma projeção na Figura 8.5 é então regular de grau 9.

Agora serão estudadas as propriedades gerais de grafos fibra. Por construção, \mathfrak{F} é periódico com periodicidade $(p-1)$, mas não é necessariamente uma rede periódica, já que a 3-conectividade pode não ser assegurada. Seja $\phi \in \mathcal{B}(N)$ um automorfismo limitado de N . Para qualquer par de fibras geodésicas F_1 e F_2 ao longo de $\langle t \rangle$, sabe-se que suas imagens $\phi(F_1)$ e $\phi(F_2)$ são fibras geodésicas ao longo da mesma direção $\langle t \rangle$, e mais ainda, $d_G(\phi(F_1), \phi(F_2)) = d_G(F_1, F_2)$. Assim, ϕ induz um automorfismo $\phi^{(t)}$ em \mathfrak{F} . É claro que $\phi^{(t)}$ é também um automorfismo limitado e que a aplicação $\phi \mapsto \phi^{(t)}$ é um homomorfismo de grupos entre $Aut(N)$ e $Aut(\mathfrak{F})$. Por conseguinte, se ϕ possui ordem finita, então $\phi^{(t)}$ também possui ordem finita. Mas o inverso não é verdade, uma vez que qualquer translação ao longo de t em N é mapeada na identidade em $Aut(\mathfrak{F})$. Agora será aplicado o conceito de grafos fibra para provar a estabilidade do subconjunto dos automorfismos de ordem finita em $Aut(N, \mathcal{T})$ com respeito à composição. O argumento é por indução sobre a periodicidade p da rede. O passo inicial (redes 1-periódicas) é demonstrado na próxima seção. O passo indutivo é provado na Seção 8.5.

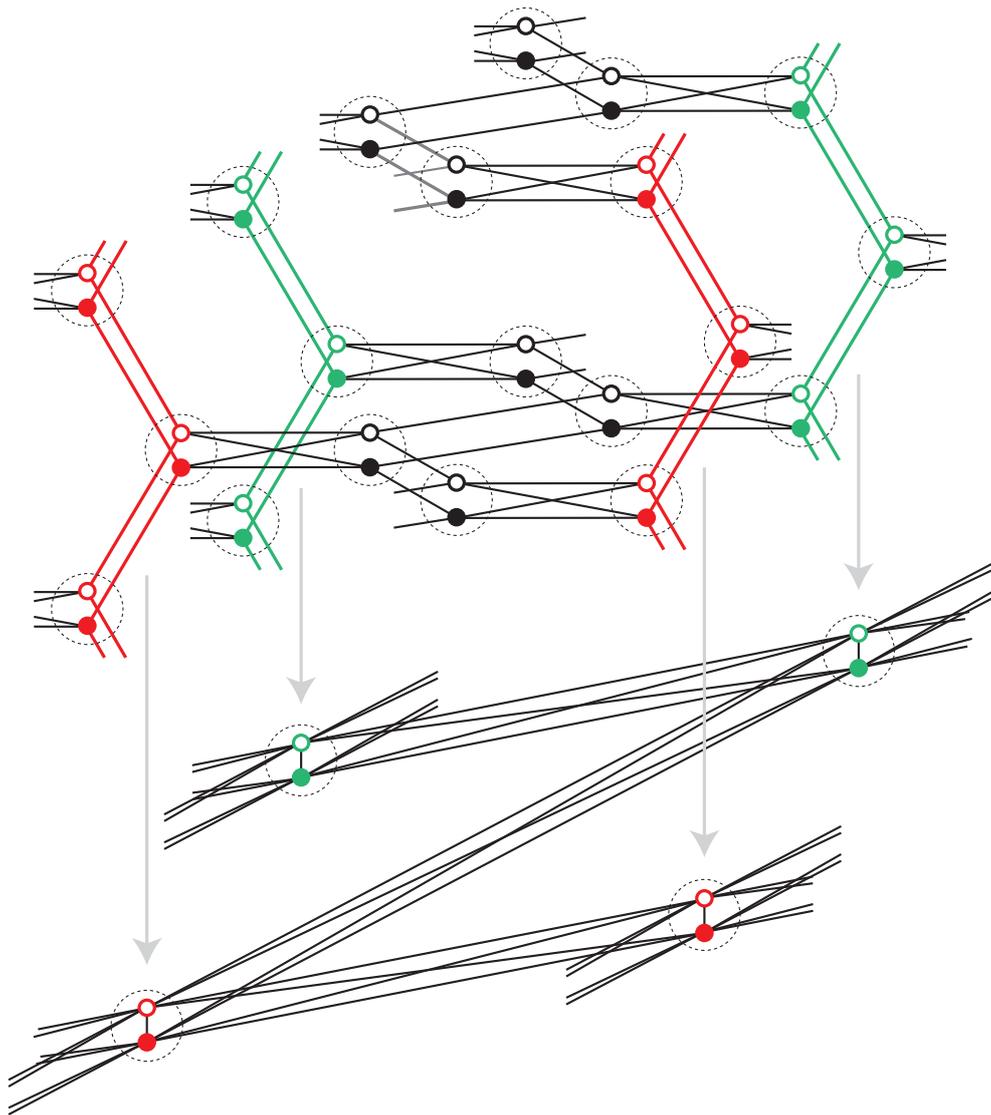


Figura 8.5: Uma representação da rede correspondente ao empacotamento esférico $4/4/o19$ com fibras geodésicas ao longo da direção 001 - desenhadas ao longo da vertical da página; as fibras coloridas (verde e vermelha) da rede 3-periódica formam um conjunto de vértices de uma rede 2-periódica regular de grau 9 mostrada como projeção.

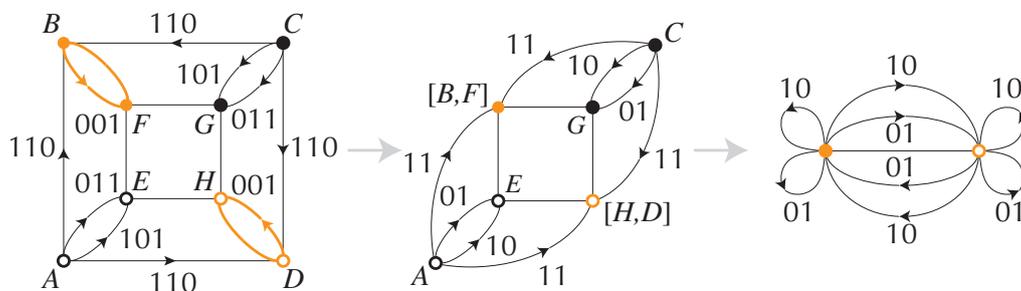


Figura 8.6: Passos de redução do (esquerda) grafo de voltagem da rede correspondente ao empacotamento esférico $4/4/o19$ indicando em amarelo os grafos de voltagem das duas fibras geodésicas que colidem ao longo da direção 001 até o (direita) grafo de voltagem do respectivo grafo fibra.

8.4 Automorfismos Limitados de Ordem Finita em Grades 1-Periódicas

Um automorfismo numa grade periódica pode ser considerado como uma permutação de vértices, e conseqüentemente pode ser escrito na notação cíclica. Para automorfismos de ordem n , a decomposição em ciclos contém apenas ciclos de tamanho no máximo n . Por outro lado, um automorfismo limitado de ordem infinita contém apenas ciclos infinitos. Suponha, por contradição, que exista um ciclo finito de comprimento m na decomposição de um automorfismo ϕ de ordem infinita. Então ϕ^m , outro automorfismo limitado, possui vértices fixos; de acordo com a Propriedade P_4 da Seção 4.3, ϕ^m possui ordem finita, em contradição com a hipótese.

Lema 8.4.1. *Um automorfismo limitado de ordem infinita numa grade 1-periódica (N, \mathcal{T}) se decompõe em um número finito de ciclos infinitos.*

Demonstração. Suponha que a célula unitária da grade tenha sido levantada de uma árvore geradora do grafo quociente N/\mathcal{T} . Seja então ϕ um automorfismo limitado de ordem infinita com norma $|\phi|$ e n o número máximo de células separando dois vértices a uma distância $|\phi|$ em N . Por simplicidade, define-se uma supercélula associada ao grupo de translação \mathcal{T}^n e as novas células Ω_i para $i \in \mathbb{Z}$ são indexadas de acordo com a respectiva translação $t^{ni} \in \mathcal{T} = \langle t \rangle$ tal que $\Omega_i = t^{ni}(\Omega_0)$ para alguma célula origem Ω_0 . Isto é, de acordo com estas escolhas, dados dois vértices A e B em Ω_i e Ω_j respectivamente, $d_G(A, B) > |\phi|$ sempre que $|j - i| > 1$. Seja z o número de vértices da supercélula: os vértices em Ω_0 originam no máximo z ciclos infinitos na decomposição em ciclos de ϕ . Suponha agora que nem todos os vértices em células Ω_i para $i > 0$ pertençam a estes ciclos e tome um deles, V em Ω_l por exemplo, à menor distância de Ω_0 (o próximo argumento pode ser facilmente adaptado para $i < 0$). Então, todas as suas imagens $\phi^m(V)$ e $\phi^{-m}(V)$ para $m > 0$ pertencem a supercélulas Ω_i para $i \geq l$. Mais exatamente, para qualquer supercélula Ω_k ($k > l$) existe um valor de $r > 0$ tal que $\phi^m(V) \in \Omega_i$ com $i > k$ para todo $m \geq r$ (Figura 8.7). Mas o mesmo também vale para ϕ^{-1} . Seja D o diâmetro da supercélula (distância máxima entre dois vértices da célula). De acordo com a definição de supercélula, pode-se ver que existe uma imagem $\phi^{-s}(V)$ ($s > 0$) na mesma supercélula contendo $\phi^r(V)$, conseqüentemente a uma distância menor que D deste vértice. Então $d_G(\phi^{r+s}(V), V) = d_G(\phi^r(V), \phi^{-s}(V)) < D$, uma contradição já que k pode ser tomado grande o suficiente de modo a impor $d_G(\Omega_l, \Omega_k) > D$. \square

Observação 8.4.1. *Vale a pena observar que o argumento desenvolvido na demonstração acima tem uma importância ainda maior. Ele também implica que as imagens $\phi^r(V)$ e $\phi^{-r}(V)$ ($r > 0$) de qualquer vértice por um automorfismo ϕ de ordem infinita não pode acumular no mesmo lado infinito de V .*

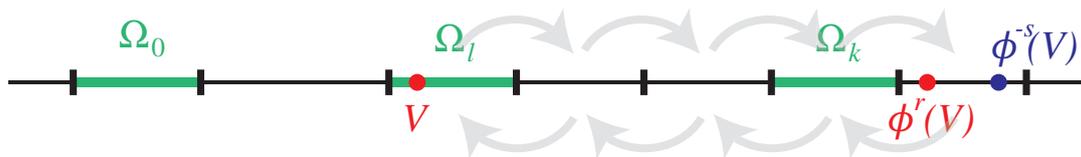


Figura 8.7: Imagens $\phi^{-s}(V)$ e $\phi^r(V)$ na mesma supercélula.

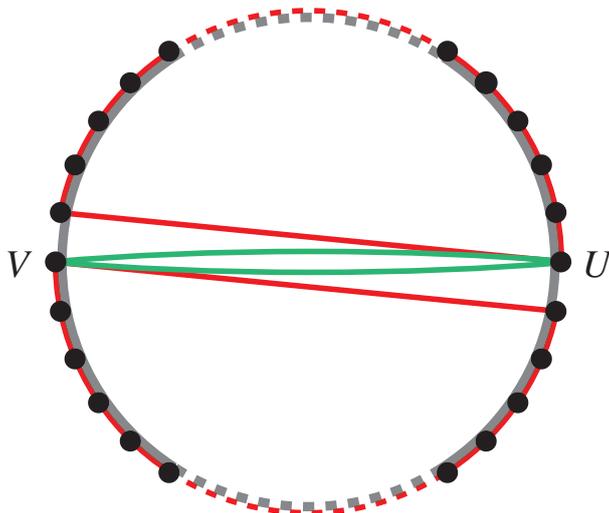


Figura 8.8: Produto de (linha preta) uma permutação cíclica ou (linha vermelha) duas permutações cíclicas por uma transposição (linha verde); todos os ciclos possuem orientação no sentido anti-horário. Linhas tracejadas indicam que o ciclo correspondente pode ser finito ou infinito.

Agora serão vistas algumas propriedades de permutações em conjuntos infinitos. Como qualquer ciclo finito pode ser escrito como um produto de transposições, primeiramente será analisado o produto $(U, V)p$ de uma ou duas permutações cíclicas p por uma transposição (U, V) . Este produto é esquematicamente mostrado na Figura 8.8, onde cada permutação cíclica é desenhada como um ciclo direcionado e uma transposição simples (U, V) foi representada como um 2-ciclo: todos estes ciclos possuem orientação no sentido anti-horário.

Duas situações diferentes podem ocorrer, mas em cada caso arestas entrando são trocadas em U e V como resultado da composição. Se ambos os vértices U e V pertencem ao suporte do mesmo ciclo, pode-se ver facilmente na Figura 8.8 que a permutação cíclica (em preto) seguida da transposição (em verde) se decompõe em duas permutações cíclicas (em vermelho). Se o ciclo inicial é infinito, o produto se decompõe em um ciclo finito e outro infinito. O suporte da permutação finita contém todos os vértices entre U e V , incluindo o primeiro vértice U . A operação toda também pode ser entendida como uma excisão do intervalo $[U, V[$ do suporte do ciclo inicial, com subsequente fechamento de ambos os ciclos.

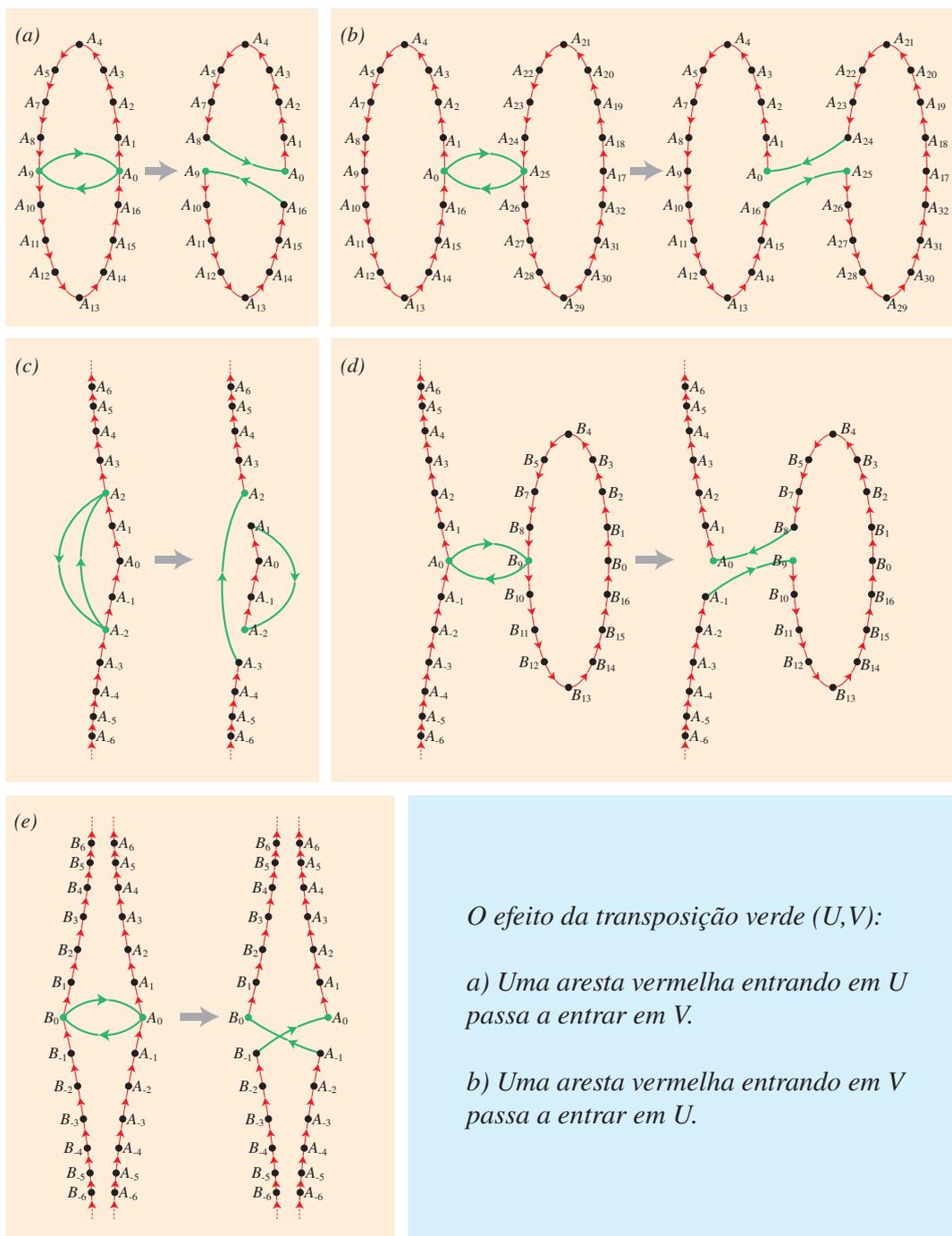


Figura 8.9: Algumas combinações de permutações: em (a), uma transposição com ambos os vértices no suporte de um 16-ciclo causa uma excisão de um 8-ciclo. Em (b), uma transposição com um vértice em cada 16-ciclo, causando sua inserção e correspondente união dos ciclos. Em (c), uma transposição com os vértices no suporte de um ciclo infinito provocando uma excisão de um 4-ciclo. Em (d), uma transposição com um vértice num ciclo finito e outro num infinito, causando sua inserção e novamente uma união dos ciclos. Em (e), uma transposição com um vértice em cada ciclo infinito, causando a troca das partes semi-infinitas. Observe que, em (c), (d) e (e), o número de ciclos infinitos permanece inalterado.

Se, por outro lado, U e V pertencem ao suporte de duas permutações cíclicas disjuntas, pelo menos uma delas com suporte finito, o inverso claramente ocorre. Isto é, ambos os ciclos abrem em U e V e o ciclo finito é inserido no outro. Se, entretanto, ambos os ciclos são infinitos, então o produto ainda contém dois ciclos infinitos que possuem trocadas as partes semi-infinitas começando nos vértices U e V . Então foi provado o seguinte:

Lema 8.4.2. *A composição de um produto finito de ciclos infinitos por uma transposição pode criar um ciclo finito por excisão, mas não altera o número de ciclos infinitos.*

Exemplo 8.4.1. *Na Figura 8.9, pode-se observar o efeito de uma transposição (U, V) , destacada em verde, sobre ciclos finitos e infinitos. Sempre uma aresta vermelha entrando em U passa a entrar em V , e uma aresta vermelha entrando em V passa a entrar em U . Desta forma, uma transposição com ambos os vértices no suporte de um mesmo ciclo provoca uma excisão (a). Se os vértices estão em ciclos diferentes, a transposição os une, formando um único ciclo (b). Em (c) e (d) observam-se os análogos a (a) e (b), com um dos ciclos sendo infinito. O resultado também é uma excisão e uma inserção, respectivamente. Finalmente, em (e), quando cada vértice está num ciclo infinito, ocorre a troca das partes semi-infinitas de ambos. Em todos os casos, observa-se que o número de ciclos infinitos não foi alterado.*

Para a prova do próximo resultado, será necessária um tipo de convergência pontual para permutações em conjuntos infinitos. Diz-se que uma sequência p_i , $i \in \mathbb{N}$ de permutações admite o limite p se, para todo elemento U , pode-se encontrar um inteiro n tal que $p_i(U) = p(U)$ sempre que $i > n$.

Lema 8.4.3. *Numa grade 1-periódica N , o produto de dois automorfismos limitados de ordens finita e infinita não pode ser um automorfismo de ordem finita. Como consequência, o conjunto de automorfismos limitados de ordem finita é estável por composições.*

Demonstração. Será considerada a composição $f\phi$ de dois automorfismos limitados: ϕ , de ordem infinita e f , de ordem finita, ambos escritos em sua forma cíclica. Então $\phi = \prod_{k \in K} \Gamma_k$, $K \subset N$ contém um número finito de ciclos infinitos disjuntos Γ_k e $f = \prod_{i \in \mathbb{N}} C_i$ contém uma quantidade enumerável de ciclos finitos disjuntos C_i , que se decompõem como um produto de transposições $C_i = \prod_j \gamma_{i,j}$. Define-se a permutação de vértices $p_m = \prod_{i \leq m} C_i \phi$, ou, recursivamente, $p_{m+1} = C_{m+1} p_m$, com $p_0 = C_0 \phi$; claramente a sequência p_m converge para o produto $f\phi$ já que os ciclos C_i são disjuntos. Note que as permutações p_m são limitadas ($|p_m| \leq |f| + |\phi|$) mas não precisam necessariamente ser automorfismos, apenas o limite p . Como o produto de

ciclos disjuntos comuta, pode-se escolher a sequência C_i de maneira que o suporte da permutação $S_m = \prod_{i \leq m} C_i$ cobre uma bola (ver definição no Capítulo 3) de raio que aumenta com m em torno da célula original Ω_0 . Agora, somente transposições $\gamma_{i,j}$ em S_m que atuam num simples ciclo infinito de ϕ podem criar um ciclo finito por excisão. Aplicando-se repetidamente o Lema 8.4.2, observa-se que o produto de ϕ e $\prod_{i \leq m} C_i$ não muda o número de ciclos infinitos, mas pode criar uma quantidade finita de ciclos finitos dentro da bola correspondente. Para que seja obtida uma permutação de ordem finita no limite $m \rightarrow \infty$, é necessário romper ciclos infinitos em ciclos finitos neste limite. Mas isto só pode ocorrer se a distância ao longo do ciclo infinito entre os vértices trocados por transposições $\gamma_{i,j}$ no passo da excisão não sejam limitadas. Agora, numa grade 1-periódica, a distância de algum vértice a suas sucessivas imagens ao longo de qualquer ciclo infinito aumenta indefinidamente. Entretanto, transposições não limitadas não podem existir na decomposição em ciclos de automorfismos limitados de ordem finita. Isto demonstra que o produto $f\phi$ não pode ter ordem finita, ou equivalentemente, que não é possível encontrar dois automorfismos limitados f e g de ordem finita tal que o produto $f^{-1}g = \phi$ possui ordem infinita. \square

A demonstração é baseada na observação de que, como a bola está aumentando no passo m , e seu raio já é maior que $|f| + |\phi|$, a ação do ciclo C_m está restrita a vértices em um de seus limites. Note que a convergência já é alcançada para vértices no interior da bola. Depois da composição de p_{m-1} com C_m , os ciclos infinitos resultantes em p_m ainda cruzam a bola em intervalos menores que $|f| + |\phi|$. Esta propriedade é mantida até o limite p . A eliminação de ciclos infinitos depois da convergência somente poderia ocorrer se ciclos finitos C_m atuassem em ambos os lados da bola. Um exemplo explícito do mecanismo de convergência para permutações limitadas ou não limitadas numa situação semelhante é discutido no Apêndice A.

8.5 Automorfismos Limitados de Ordem Finita em Grades p -periódicas

Ainda é necessário um resultado preparatório para a generalização do Lema 8.4.3 a grades de periodicidade arbitrária.

Lema 8.5.1. *Se a órbita por algum automorfismo limitado ϕ de toda fibra geodésica numa rede p -periódica N é finita, então ϕ possui ordem finita.*

Demonstração. Seja D o diâmetro do grafo quociente N/\mathcal{T} . Um vértice arbitrário V em N está a uma distância menor que D de qualquer fibra num conjunto composto

por p fibras geodésicas ao longo de direções independentes agindo como eixos de um referencial. Como as órbitas destas p fibras são finitas, então a órbita de V também é finita, mostrando que alguma potência de ϕ fixa V , e conseqüentemente, de acordo com a propriedade P_4 da Seção 4.3, ϕ possui ordem finita. \square

Teorema 8.5.1. *O conjunto $\mathcal{F}(N)$ de automorfismos limitados de ordem finita numa grade p -periódica (N, \mathcal{T}) é estável por composições.*

Demonstração. A prova é por indução sobre a periodicidade da grade. O Lema 8.4.3 mostra que o resultado é verdadeiro para grades 1-periódicas. Suponha que o resultado seja verdadeiro até a periodicidade p . Seja então (N, \mathcal{T}) uma grade $(p + 1)$ -periódica e suponha que $\phi_1, \phi_2 \in \mathcal{F}(N)$ sejam tais que $\phi_1\phi_2 \notin \mathcal{F}(N)$. De acordo com o Lema 8.5.1, pode-se encontrar pelo menos uma fibra geodésica F em N cuja órbita pelo produto $\phi_1\phi_2$ é infinita. Considere então o grafo fibra \mathfrak{F} p -periódico correspondente e as imagens de tais automorfismos pela aplicação $Aut(N) \rightarrow Aut(\mathfrak{F})$. Observa-se que $\phi_1^{(t)}, \phi_2^{(t)} \in \mathcal{F}(\mathfrak{F})$, uma vez que a aplicação descrita é um homomorfismo de grupos, mas $\phi_1^{(t)}\phi_2^{(t)} = (\phi_1\phi_2)^{(t)} \notin \mathcal{F}(\mathfrak{F})$, em contradição com a hipótese de indução. \square

8.6 Teorema Fundamental das Redes Não Cristalógraficas

8.6.1 Redes NC com vértices fixos

Agora serão consideradas redes NC admitindo automorfismos limitados com vértices fixos. Foi mostrado que tais automorfismos possuem ordem finita (Propriedade P_4 da Seção 4.3). Será denotado por $\mathcal{F}(N)$ o subconjunto dos automorfismos limitados de ordem finita de $\mathcal{B}(N)$. O Teorema 8.5.1 mostra que $\mathcal{F}(N)$ é estável por composições; é então facilmente verificado que $\mathcal{F}(N)$ é subgrupo normal de $Aut(N)$.

Teorema 8.6.1. *As órbitas por $\mathcal{F}(N)$ do conjunto de vértices definem um sistema de imprimitividade periódico com blocos finitos para o grupo de automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$.*

Demonstração. Sabe-se que as órbitas de um subgrupo normal formam um sistema de imprimitividade [12]. Suponha que um bloco Δ contenha dois vértices translacionalmente equivalentes U e $t(U)$. Então existe $f \in \mathcal{F}$ tal que $f(U) = t(U)$, ou $f^{-1}t(U) = U$, de maneira que $f^{-1}t = g \in \mathcal{F}(N)$, e conseqüentemente $t = fg \in \mathcal{F}(N)$, uma contradição. Então um bloco deve conter no máximo um vértice em qualquer vértice-retículo. Seja agora Δ a órbita de U com respeito a

$\mathcal{F}(N)$; como $\mathcal{F}(N)$ é um subgrupo normal, tem-se $t\mathcal{F}(N)t^{-1} = \mathcal{F}(N)$, do que se pode concluir que $t(\Delta)$ é a órbita de $t(U)$. \square

Seja σ a respectiva partição equivoltagem do conjunto de vértices em blocos de imprimitividade para $\mathcal{B}(N)$. É claro que o estabilizador \mathcal{B}_σ de sigma é um subgrupo de $\mathcal{F}(N)$, já que os blocos são finitos. Por definição, $\mathcal{F}(N) \leq \mathcal{B}(N)_\sigma$, e conseqüentemente $\mathcal{F}(N) = \mathcal{B}(N)_\sigma$ é transitivo em cada bloco. De acordo com o capítulo anterior, é possível atribuir voltagens ao grafo de voltagem da rede de maneira a apresentar uma partição equivoltagem. Mais ainda, qualquer representação baricêntrica da rede vai apresentar colisões de vértices.

8.6.2 Redes NC com arestas fixas

Suponha agora que alguma rede NC admita automorfismos limitados não triviais que fixam arestas, mas não admita nenhum automorfismo limitado não trivial que fixa vértices. Isto implica que o respectivo automorfismo, que pode ser denotado por ϕ , permuta os dois extremos da aresta fixa e que $\phi^2 = id$, a identidade de $Aut(N)$. A grade escada fornece um exemplo de tais automorfismos. A maneira de lidar com tais redes é inserindo um vértice na aresta fixada (transformando a mesma num caminho de tamanho 2). A nova rede possui automorfismos limitados de ordem 2 fixando os vértices adicionados, mas sem arestas fixas. Então há um sistema de imprimitividade periódico para $\mathcal{B}(N)$ com blocos finitos tal que i) os dois vértices ligados ao vértice adicionado pertencem ao mesmo bloco e ii) o vértice adicionado pertence a outro bloco. Se o vértice inserido for agora deletado, de forma a restaurar a aresta original, é obtido um sistema de imprimitividade periódico não trivial com blocos finitos da rede inicial onde os dois vértices extremos da aresta fixa pertencem ao mesmo bloco. Isto mostra que as conclusões da subseção anterior com respeito à existência de uma partição equivoltagem do grafo de voltagem e com respeito à existência de colisões em qualquer representação baricêntrica da rede também se aplicam neste caso.

8.6.3 Redes NC com automorfismos limitados com ação livre

Foi demonstrado no Capítulo 6 que qualquer rede NC N com grupo de automorfismos limitados não abeliano que atua livremente $\mathcal{B}(N)$ pode ser obtida a partir de um grafo finito ao se atribuírem voltagens (h_i, t_i) no produto direto $\mathcal{H} \times \mathbb{Z}^n$ às suas arestas, onde \mathcal{H} é um grupo de permutações finito não abeliano. Neste caso, $\mathcal{B}(N)$ é isomorfo ao produto subdireto de \mathcal{H} e \mathbb{Z}^n gerado pelas voltagens (h_i, t_i) . Suponha agora que as duas permutações h_i e h_j não comutem; o comutador

$[(h_i, t_i), (h_j, t_j)] = ([h_i, h_j], 0)$ corresponde a um automorfismo limitado não trivial de ordem finita. Então o subgrupo $\mathcal{F}(N)$ é não trivial, o que mostra que tais redes também possuem um sistema de imprimitividade periódico com blocos finitos.

Suponha finalmente que um grupo abeliano de automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$ atue livremente sobre a rede. Então pode-se tomar o quociente (finito) $N/\mathcal{B}(N)$ (Teorema 6.1.1) e atribuir voltagens em $\mathcal{B}(N)$ às respectivas arestas, o que mostra que $\mathcal{B}(N)$ é finitamente gerado. De acordo com o teorema fundamental de grupos abelianos finitamente gerados, $\mathcal{B}(N)$ é produto direto de grupos cíclicos [11]. O caso em que $\mathcal{B}(N)$ é livre abeliano corresponde a uma rede cristalográfica. Se $\mathcal{B}(N)$ é abeliano, mas não livre, então existe algum automorfismo de ordem finita e pode-se novamente concluir como acima. Então acabou de ser demonstrado o **Teorema Fundamental das Redes Não Cristalográficas**:

Teorema 8.6.2. *Qualquer rede não cristalográfica pode ser representada por um grafo de voltagem que possui uma partição equivoltagem. Qualquer representação baricêntrica periódica da rede apresenta colisões de vértices. Vértices equivalentes por automorfismos limitados de ordem finita são projetados no mesmo ponto do espaço Euclidiano.*

A recíproca da última afirmação não é verdadeira, e isto leva a um esquema de classificação para redes NC. Dada uma rede NC com sistema de imprimitividade σ , pode acontecer de a rede periódica $N/\sigma = N_1$ ser também NC, com sistema de imprimitividade σ_1 . Denota-se então por $N_2 = N_1/\sigma_2$, e de forma indutiva $N_{k+1} = N_k/\sigma_k$. O tamanho do grafo de voltagem N_{k+1}/\mathcal{T} , que é o quociente de N_k/\mathcal{T} pela partição equivoltagem, é estritamente menor que o último se a partição não é a trivial. Como redes reticulares (com quocientes de tamanho 1) são redes cristalográficas, o processo tem que ser finito, e tem que terminar numa rede cristalográfica. Pode-se dizer que uma rede NC de *tipo* k se o quociente N_k é uma rede cristalográfica.

8.7 A estrutura do grupo de automorfismos limitados

Da análise anterior pode-se deduzir que o grupo quociente $\mathcal{B}(N)/\mathcal{F}(N)$ é em geral um subgrupo do grupo dos automorfismos limitados da grade quociente N/σ . Seja $\phi \in \mathcal{B}(N)$ e considere a classe de automorfismos $\phi\mathcal{F}(N) \in \mathcal{B}(N)/\mathcal{F}(N)$. Como somente automorfismos na classe identidade $\mathcal{F}(N)$ podem ter ordem finita, o quociente $\mathcal{B}(N)/\mathcal{F}(N)$ não possui automorfismos não triviais de ordem finita. De acordo com as conclusões da última seção, $\mathcal{B}(N)/\mathcal{F}(N)$ é abeliano livre, e por isso isomorfo a um subgrupo de translação da rede periódica N/σ . Isto leva ao teorema:

Teorema 8.7.1. *O grupo de automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$ da rede NC periódica (N, \mathcal{T}) é isomorfo ao produto semidireto de um grupo de translação \mathcal{T} pelo subgrupo $\mathcal{F}(N)$ de automorfismos limitados de ordem finita: $\mathcal{B}(N) \cong \mathcal{T} \ltimes \mathcal{F}(N)$.*

Este último resultado também fornece uma interpretação simples para automorfismos limitados $\phi \in \mathcal{B}(N)$. Já que eles podem ser escritos como um produto $\phi = ft$ de uma translação $t \in \mathcal{T}$ seguido por um automorfismo de ordem finita $f \in \mathcal{F}$, pode-se dizer que qualquer automorfismo limitado aproxima alguma translação. Como os blocos de imprimitividade são finitos, existe uma cota superior $|\mathcal{F}|$ para a norma de qualquer automorfismo de $\mathcal{F}(N)$ de maneira que $d_G(\phi(V), t(V)) \leq |\mathcal{F}|$ para qualquer vértice V da rede. Mais ainda, o automorfismo limitado ft possui o mesmo efeito que a translação t na representação baricêntrica da rede.

8.8 Uma rede NC simples baseada em nbo

A Figura 8.10 mostra uma representação pseudo-baricêntrica de uma rede NC construída a partir de **nbo**. Seu grafo de voltagem mostra uma partição equivoltagem com apenas uma célula não trivial: os dois vértices respectivos foram envolvidos com um pequeno círculo amarelo em (b). Os vértices correspondentes em cada bloco da rede podem permutar de maneira bem independente dos demais blocos. Isto fornece $\mathcal{F}(N) = \mathcal{S}_2^{\mathbb{Z}^3}$, de modo que o grupo de automorfismos limitados é isomorfo ao produto entrelaçado $\mathbb{Z}^3 \text{ Wr } \mathcal{S}_2$. Tomando o quociente do grafo de voltagem pela partição equivoltagem, obtém-se o grafo quociente na Figura 8.10(c). Este grafo também mostra uma partição equivoltagem com três células formadas por pares de vértices azuis, verdes e vermelhos, respectivamente. O quociente por esta partição é o grafo de voltagem da rede **nbo** mostrado em (d). A rede **nbo** é uma rede cristalográfica, e então a rede NC possui tipo 2. Também pode ser visto na figura que a rede NC e a **nbo** possuem a mesma representação baricêntrica.

Depois que os dois vértices circulosos foram identificados no quociente N/σ , um único novo automorfismo limitado passa a existir. O respectivo grafo de voltagem possui de fato um automorfismo de ordem 2 que preserva voltagens sobre todos os ciclos; o automorfismo correspondente da rede comuta com o grupo de translação de modo que $\mathcal{F}(N/\sigma) \cong \mathcal{S}_2$ e $\mathcal{B}(N/\sigma) \cong \mathcal{S}_2 \times \mathbb{Z}^3$. Deve ser notado que o grafo de voltagem N/\mathcal{T} também apresenta um automorfismo que preserva voltagens sobre seus ciclos, indicando a existência de um automorfismo limitado da rede que respeita a estrutura periódica. Este automorfismo, também de ordem 2, troca simultaneamente todos os pares de vértices que colidem. Consequentemente, automorfismos do grafo de voltagem não fornecem informação suficiente para a caracterização do grupo $\mathcal{B}(N)$. A análise dos grupos de correlação mostra que permutações dentro das

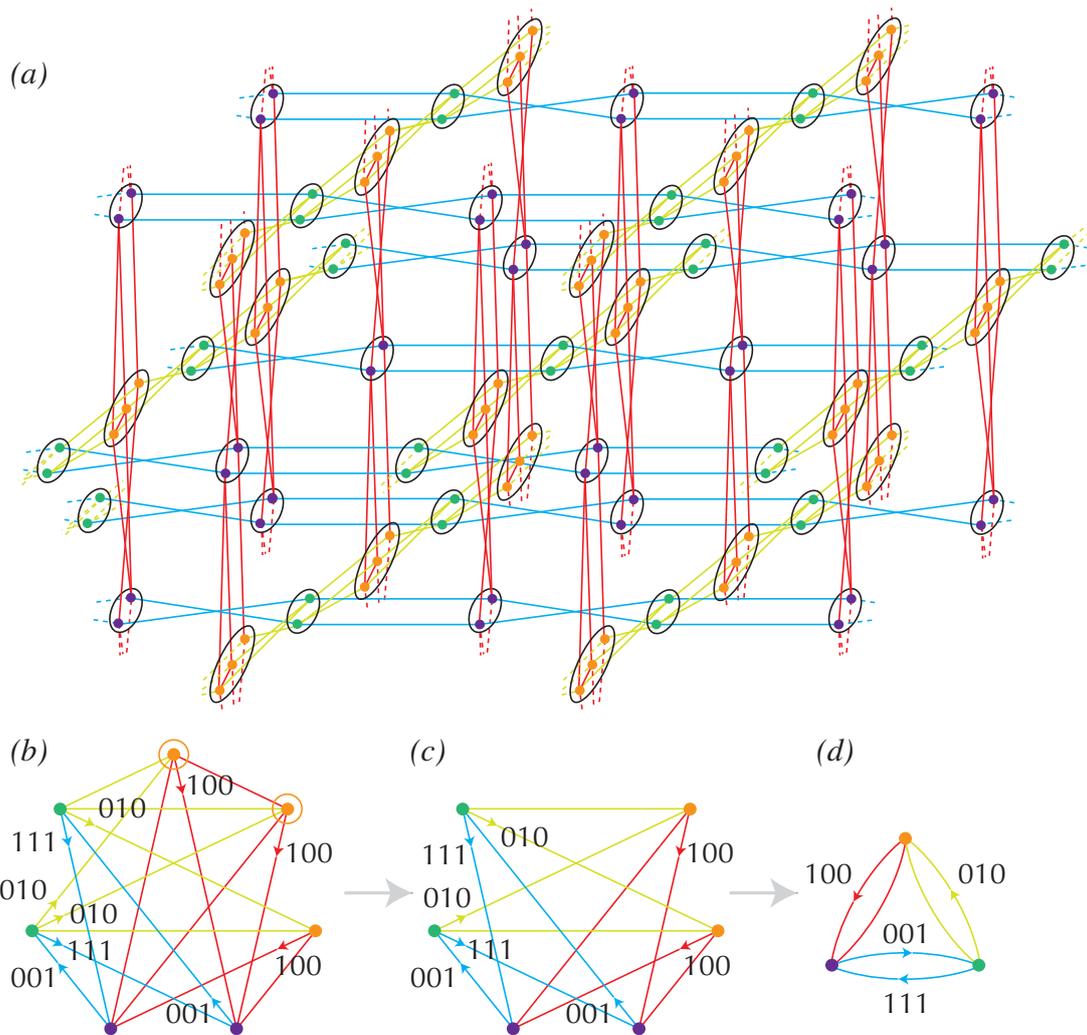


Figura 8.10: Uma representação de uma rede NC construída a partir de **nbo** (a) e a sequência de grafos de voltagem mostrando partições equivoltagem começando do grafo de voltagem da rede NC (b) ao grafo de voltagem da **nbo** (d).

células da partição equivoltagem não possuem correlação no caso da rede N , mas possuem correlação completa no caso de seu quociente N/σ .

8.9 Considerações Adicionais

Os resultados do Capítulo 7 e do Capítulo 8 permitem a construção do Teorema Fundamental das Redes Não Cristalográficas. Sabe-se a partir deste teorema que todas as redes NC são instáveis. Reciprocamente, isto também permite dizer que redes estáveis são cristalográficas. Também a partir do teorema sabe-se que os grafos de voltagem de redes NC admitem partição equivoltagem. Na realidade, não apenas os grafos de voltagem de redes NC, mas de qualquer rede que possui um sistema de blocos finitos de imprimitividade para o grupo dos automorfismos limitados. No capítulo anterior, na Seção 7.5.5, foi visto que grafos de voltagem de algumas redes cristalográficas admitem partição equivoltagem, o que implica colisões de vértices na representação baricêntrica da rede. Entretanto, grupos de correlação triviais entre células diferentes proíbem a existência de automorfismos limitados de ordem finita. Com isto, é importante frisar que, mesmo que o grafo de voltagem de uma rede instável admita partição equivoltagem, é necessária uma análise desta partição antes de classificar a rede como NC.

Para finalizar, é importante ter cuidado com a recíproca: alguns grafos de voltagem não admitem partição equivoltagem e nem correspondem a redes cristalográficas instáveis [4]. O caso de grafos de voltagem com uma ponte (uma aresta que, se retirada, desconecta o grafo) é conhecido, mas condições mais gerais ainda não foram determinadas.

Capítulo 9

Conclusões

9.1 Resultados

O objetivo inicial de estudar em que condições as redes periódicas não cristalográficas apresentam colisões em suas representações baricêntricas foi completamente atingido, e dividido neste trabalho em três etapas: o Capítulo 6, correspondendo ao artigo [7]; o Capítulo 7, baseado no artigo [8] e o Capítulo 8, correspondendo ao artigo [39].

O Capítulo 6 compreende as redes NC que possuem grupos de automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$ não abelianos que atuam livremente. O Teorema 6.1.1 assegura que tais grupos de automorfismos limitados são finitamente gerados, o que simplifica a abordagem. Esta natureza mais simples permite concluir não apenas que as representações baricêntricas de tais redes possuem colisões (Corolário 6.1.1), mas também permite o desenvolvimento de um método para construção de exemplos de redes NC com tais características, explorado na Seção 6.2. Ao fim do capítulo, demonstra-se que qualquer rede NC com grupo de automorfismos limitados não abeliano que atua livremente $\mathcal{B}(N)$ pode ser obtida a partir de um grafo finito ao se atribuírem voltagens (h_i, t_i) no produto direto $\mathcal{H} \times \mathbb{Z}^n$ às suas arestas, onde \mathcal{H} é um grupo de permutações finito não abeliano (Proposição 6.3.1).

O Capítulo 7 trata de redes (cristalográficas ou não) com blocos finitos de imprimitividade para o grupo dos automorfismos limitados $\mathcal{B}(N)$. Inicialmente, é introduzido um exemplo não trivial de representação baricêntrica limitada (Figura 7.1); técnicas baseadas em representações limitadas e na ferramenta vetor representação, definida na Seção 7.2, permitem a demonstração de um teorema de unicidade (Teorema 7.2.1), que garante a existência de uma, e somente uma, representação baricêntrica limitada por segmentos de uma rede periódica que leva um dado vértice-retículo sobre algum ponto-retículo pré-definido no espaço Euclidiano. Este resultado, além de uma importância solo, permite a demonstração de dois co-

rolários. O Corolário 7.4.1 afirma que se existe um automorfismo f não trivial na rede periódica (N, \mathcal{T}) que fixa todo vértice num vértice-retículo $[X]$, então qualquer vértice em (N, \mathcal{T}) colide com sua imagem por f em qualquer representação periódica baricêntrica da rede no espaço Euclideano. Ainda mais importante, o Corolário 7.4.2 é o ápice deste capítulo, e garante que redes periódicas com um sistema não trivial de blocos finitos de imprimitividade para o subgrupo de automorfismos limitados \mathcal{B} admitem colisões em qualquer representação baricêntrica no espaço Euclideano, cada bloco sendo representado por um único ponto. Como consequência, o grafo de voltagem apresenta uma partição equitável que respeita as voltagens sobre as arestas, intitulada partição equivoltagem (Seção 7.5). Permutações entre os elementos dos blocos de imprimitividade e que são restritas pela existência das arestas entre blocos são caracterizadas por grupos de correlação (Seção 7.6), uma ferramenta que permite um maior entendimento sobre o grupo dos automorfismos limitados \mathcal{B} nestes casos. Exemplos não triviais de redes NC (com pontos fixos e sem pontos fixos) são explorados do ponto de vista das partições equivoltagem e dos grupos de correlação, e um algoritmo geral é proposto na Seção 7.7. O grupo \mathcal{B} de uma tal rede pode ser descrito utilizando-se produtos entrelaçados de grupos de permutações finitos por grupos de translações.

O Capítulo 8 foca num subconjunto de $\mathcal{B}(N)$ que tem importância central neste trabalho: o conjunto dos automorfismos de ordem finita $\mathcal{F}(N)$ de uma rede NC. Demonstra-se, através de técnicas de convergência de permutações (Lema 8.4.3) e da utilização da ferramenta grafo fibra, que tal conjunto é estável por composições (Teorema 8.5.1), e a partir daí demonstra-se que ele é na realidade um subgrupo normal de $\mathcal{B}(N)$. Isto permite a construção de uma partição do conjunto de vértices em blocos finitos de imprimitividade através das órbitas de $\mathcal{F}(N)$ (Teorema 8.6.1). Analisando cada um dos casos possíveis para $\mathcal{B}(N)$, conclui-se que toda rede NC admite partição do conjunto de vértices em blocos finitos de imprimitividade através das órbitas de $\mathcal{F}(N)$. Pelos resultados do capítulo anterior, então, pode-se concluir o Teorema Fundamental das Redes NC (Teorema 8.6), que garante que se (N, \mathcal{T}) é uma rede periódica NC, então para uma escolha adequada de origens nos vértice-retículos, o grafo quociente admite uma partição equivoltagem, e qualquer representação baricêntrica admite colisão de vértices.

9.2 Sugestões para pesquisas futuras

Embora os objetivos propostos no início deste trabalho tenham sido completamente atingidos, ainda há muito espaço para pesquisa. Primeiramente, um dos próximos objetivos pode ser a busca por exemplos de redes NC. Neste trabalho, a teoria e as ferramentas para a exploração deste tema foram bem desenvolvidas, mas os

exemplos podem ser mais explorados. A busca por novos exemplos pode ser realizada tanto pela pesquisa exaustiva na literatura atual (como foi feito com os exemplos de Sowa na Seção 7.8), quanto através do desenvolvimento de métodos para geração sistemática de exemplos não triviais. Também pode ser uma meta a criação de programas que identifiquem de imediato uma rede NC.

Outro tipo de problema que pode ser investigado é o de redes cristalográficas instáveis. Observe que redes NC foram caracterizadas como redes instáveis, o que automaticamente implica que redes estáveis devem ser cristalográficas; as redes cristalográficas instáveis, no entanto, não foram estudadas. Que condições devem satisfazer tais redes, e quais são suas propriedades? Isto precisa ser estudado com profundidade.

Também há espaço para uma abordagem mais completa com respeito à classificação dos grupos de automorfismos de redes NC em termos de Teoria de Grupos, explorando melhor o fato de que tais grupos são produtos subdiretos de produtos entrelaçados de grupos.

De uma forma geral, a natureza rica do problema, que herda conceitos de duas grandes áreas (Teoria de Grafos e de Teoria de Grupos), produz um imenso repertório de ferramentas e problemas, que podem ser explorados nas próximas investidas.

Referências Bibliográficas

- [1] WONG, H.-S. P., AKINWANDE, D. *Carbon Nanotubes and Graphene Devices*. 1 ed. London, Cambridge University Press, 2011.
- [2] CHIEH, C. “<http://www.science.uwaterloo.ca/~cchieh/cact/fig/faujasite.gif>”. 2013.
- [3] DELGADO-FRIEDRICHS, O., PROSERPIO, D., FOSTER, M., et al. “What do we know about three-periodic nets?” *J. Solid State Chem.*, v. 178, pp. 2533–2554, 2005.
- [4] EON, J.-G. “Euclidian Embeddings of Periodic Nets: Definition of a Topologically Induced Complete Set of Geometric Descriptors for Crystal Structures”, *Acta Crystallographica A*, v. 67, pp. 68–86, 2011.
- [5] DELGADO-FRIEDRICHS, O. “Equilibrium Placement of Periodic Graphs and Convexity of Plane Tilings”, *Discrete Comput. Geom.*, v. 33, pp. 67–81, 2005.
- [6] SCHWARZENBERGER, R. *N-Dimensional Crystallography*. 1 ed. London, Pitman, 1980.
- [7] DE OLIVEIRA JR, M. M., EON, J.-G. “Non-Crystallographic Nets with Freely Acting, Non-Abelian Local Automorphism Groups”, *Acta Crystallographica A*, v. 67, pp. 240–251, 2011.
- [8] DE OLIVEIRA JR, M. M., EON, J.-G. “Non-Crystallographic Nets with Finite Blocks of Imprimitivity for Bounded Automorphisms”, *Acta Crystallographica A*, v. 69, pp. 111–112, 2013.
- [9] LOTH, S., BAUMANN, S., LUTZ, C., et al. “Bistability in Atomic-Scale Antiferromagnets”, *Science*, v. 335, pp. 196–199, 2012.
- [10] GARCIA, A., LEQUAIN, Y. *Elementos de Algebra*. 1 ed. Rio de Janeiro, IMPA, 2002.

- [11] KARGAPOLOV, M. I., MERZLJAKOV, J. I. *Fundamentals of the Theory of Groups*. 1 ed. New York, Springer, 1979.
- [12] BHATTACHARJEE, M., MACPHERSON, D., MOLLER, R., et al. *Notes on Infinite Permutation Groups*. 1 ed. Berlin, Springer, 1998.
- [13] HUPPERT, B. *Endliche Gruppen I*. 1 ed. Berlin, Springer, 1967.
- [14] DIESTEL, R. *Graph Theory*. 3 ed. New York, Springer-Verlag, 2005.
- [15] HARARY, F. *Graph Theory*. 1 ed. New York, Addison-Wesley, 1972.
- [16] BONDY, J., MURTY, U. *Graph Theory*. Springer, 2008.
- [17] GODSIL, C., ROYLE, G. *Algebraic Graph Theory*. 1 ed. New York, Springer, 2001.
- [18] TROFIMOV, V. “Automorphisms of Graphs and a Characterization of Lattices”, *Izv. Akad. Nauk. SSSR Ser. Mat.*, v. 47, pp. 407–420, 1983.
- [19] TROFIMOV, V. “Graphs with Polynomial Growth”, *Mat. Sb.*, v. 123, pp. 407–421, 1984.
- [20] EON, J.-G. “Graph-Theoretical Characterization of Periodicity in Crystallographic Nets and Other Infinite Graphs”, *Acta Crystallographica A*, v. 61, pp. 501–511, 2005.
- [21] WELLS, A. *Three-Dimensional Nets and Polyhedra*. 1 ed. New York, John Wiley and sons, 1977.
- [22] O’KEEFFE, M., HYDE, B. “Plane Nets in Crystal Chemistry”, *Cryst. Res. Technol.Philos. Trans. R. Soc. A*, v. 295, pp. 553–618, 1980.
- [23] EON, J.-G., KLEE, W. E., RUTHERFORD, J., et al. “Graph Theory in Crystallography and Crystal Chemistry”, 2013.
- [24] KLEE, W. “Crystallographic Nets and their Quotient Graphs”, *Cryst. Res. Technol.*, v. 39, pp. 959–968, 2004.
- [25] O’KEEFFE, M., PESKOV, M., RAMSDEN, S., et al. “The Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR) Database of and Symbols for Crystal Nets”, *Acc. Chem. Res.*, v. 41, pp. 1782–1789, 2008.
- [26] CHUNG, S., HAHN, T., KLEE, W. “Nomenclature and Generation of Three-Periodic Nets: the Vector Method”, *Acta Crystallographica A*, v. 40, pp. 42–50, 1984.

- [27] BEUKEMANN, A., KLEE, W. “Minimal Nets”, *Z. Kristallogr.*, v. 201, pp. 37–51, 1992.
- [28] GROSS, J., TUCKER, T. *Topological Graph Theory*. 1 ed. New York, Dover, 2001.
- [29] EON, J.-G. “Infinite Geodesic Paths and Fibers”, *Acta Crystallographica A*, v. 63, pp. 53–65, 2007.
- [30] GOETZKE, K., KLEIN, H.-J. “Properties and Efficient Algorithmic Determination of Different Classes of Rings in Finite and Infinite Polyhedral Networks”, *J. Non-Cryst. Solids*, v. 127, pp. 215–220, 1991.
- [31] EON, J.-G. “Archetypes and Other Embeddings of Periodic Nets Generated by Orthogonal Projection”, *J. Solid State Chem.*, v. 147, pp. 429–437, 1999.
- [32] DELGADO-FRIEDRICH, O., PROSERPIO, D., HYDE, S., et al. “Nets with Collisions (Unstable Nets) and Crystal Chemistry”, *Acta Crystallographica A*, v. 69, pp. 535–542, 2013.
- [33] SOWA, H. “Orthorhombic Sphere Packings. IV. Trivariant Lattice Complexes of Space Groups without Mirror Planes belonging to Crystal Class mmm”, *Acta Crystallographica A*, v. 68, pp. 763–777, 2012.
- [34] FISHER, W. “Sphere-Packing Conditions for all Cubic Lattice Complexes with Three Degrees of Freedom”, *Z. Kristallogr.*, v. 140, pp. 50–74, 1974.
- [35] REIDEMEISTER, K. *Knotentheorie*. 1 ed. New York, Chelsea Pub. Co., 1948.
- [36] FRUCHT, R. “Herstellung von Graphen mit vorgegebener abstrakter Gruppe”, *Compositio Mathematica*, v. 6, pp. 239–250, 1939.
- [37] DELGADO-FRIEDRICH, O., O’KEEFFE, M. “Three-Periodic Tilings and Nets: Semiregular Nets”, *Acta Crystallographica A*, v. 59, pp. 351–360, 2003.
- [38] BLATOV, V. “Multipurpose Crystallochemical Analysis with the Program package TOPOS”, *IUCr Compcomm.*, v. 7, pp. 4–38, 2006.
- [39] DE OLIVEIRA JR, M. M., EON, J.-G. “Non-crystallographic nets: characterization - first steps towards a classification, In Preparation”, *Acta Crystallographica A*, 2013.
- [40] DELGADO-FRIEDRICH, O., O’KEEFFE, M. “Edge-transitive Lattice Nets”, *Acta Crystallographica A*, v. 65, pp. 360–363, 2009.

Apêndice A

Convergência de permutações em \mathbb{Z}

Pode-se dizer que uma permutação $p \in \mathbb{Z}$ é *limitada* se existe um inteiro $|p|$ tal que $|p(i) - i| < |p|$, para qualquer $i \in \mathbb{Z}$. Defina a translação $t : i \mapsto i + 1$ de ordem infinita e duas permutações de ordem finita $f = \prod_i (2i, 2i + 1)$ e $g = \prod_i (i, -i)$ para $i \in \mathbb{Z}$; t e f são limitadas, g não é. O primeiro produto $ft : 2i - 1 \mapsto 2i + 1$, contém um único ciclo limitado infinito transladando todos os números ímpares e fixa todo número par. O segundo produto $gt = \prod_i (-i, i - 1)$ contém infinitos 2-ciclos e não é limitado.

No primeiro caso, pode-se definir $p_m = \prod_{|i| \leq m} (2i, 2i + 1)t$, que fixa números pares no intervalo $-2m \leq i \leq 2m$, envia i a $i + 1$ para $|i| > 2m$ e $2i - 1$ a $2i + 1$ para $|i| < 2m$. Claramente p_m converge a ft , cada p_m contém um único ciclo infinito, bem como o limite.

No segundo caso (Figura A.1), define-se $p_m = \prod_{i \leq m} (i, -i)t$, que contém m 2-ciclos $(-i, i - 1)$ para $i < m$ e contém um ciclo infinito que envia i a $i + 1$ para $i < -m - 1$ e $i \geq m$, mas envia $-m - 1$ a m . Em outras palavras, o ciclo infinito é igual a t nas duas partes semi-infinitas $i < -m - 1$ e $i \geq m$ mas vai diretamente de $-m - 1$ a m . Embora todo p_m contenha um único ciclo infinito, seu limite gt não possui nenhum.

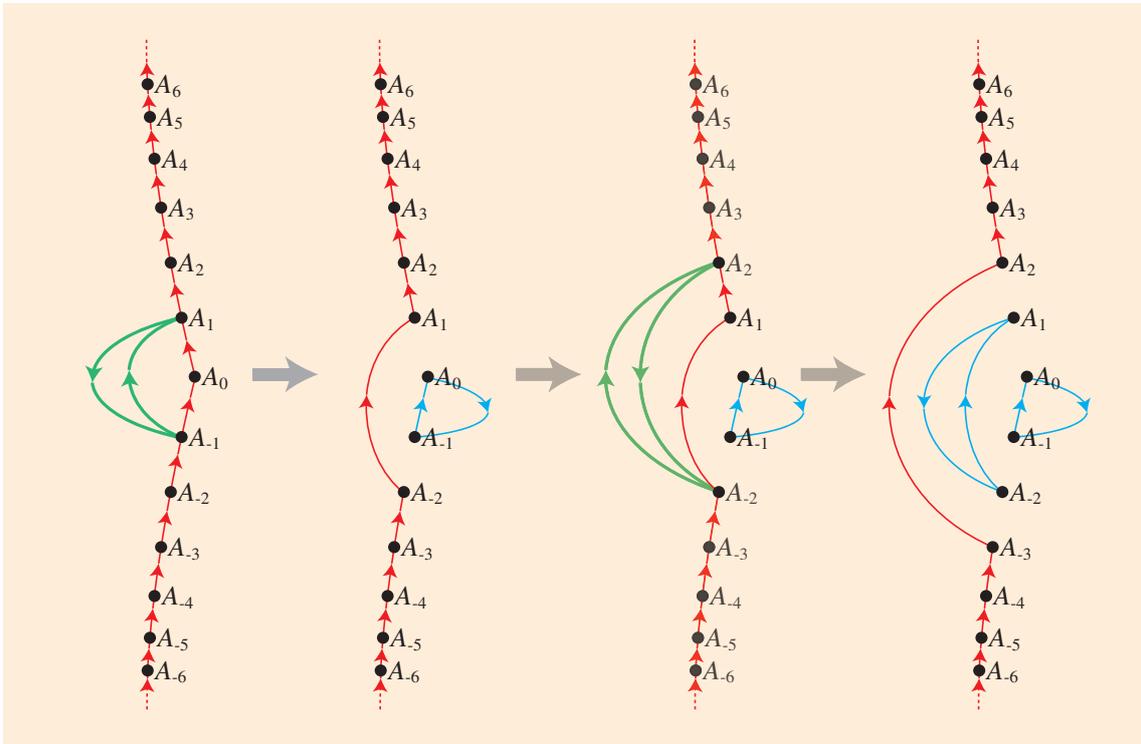


Figura A.1: Os dois primeiros passos ($m = 0$ e $m = 1$) mostrando as duas primeiras excisões de $p_m = \prod_{i \leq m} (i, -i)t$.

Índice Remissivo

- árvore, 26
 - folha de uma, 26
 - geradora, 26
- ação, 9
 - à direita, 10
 - à esquerda, 9
 - finitamente primitiva, 100
 - primitiva, 16
 - transitiva, 15
- anel, 46
 - forte, 47
- aplicação
 - constante, 114
- aplicação multiplicidade, 103
- aresta
 - espaço, 25
- atalho, 23
- automorfismo
 - limitado, 28
 - local, 28
 - norma de um, 28
 - periódico, 68
 - que atua livremente, 28
- automorfismo de grafos, 28
- automorfismo de grupo, 13
- automorfismos
 - translacionais, 37

- bloco de imprimitividade, 15
- bola (euclideana), 96
- bola (teoria de grafos), 24
- buquê, 22

- célula, 103
 - primitiva, 41
 - unitária, 41
- caminho, 23
 - geodésico, 23
- centralizador, 11
- centro, 11
- ciclo, 23
 - espaço, 25
 - vetor, 25
- cociclo
 - espaço, 25
 - vetor, 25
- colisão de vértices, 53
- comprimento reduzido, 47
- conjunto gerador, 12
- conjunto limitado, 96
- corda, 26
- correlação
 - ausência de, 114
 - completa, 114
 - grupo de, 114

- diâmetro, 23
- digrafo, 21
- distância, 23
- domínio fundamental, 10
- duplo hcb, 118

- elemento, 21
- epimorfismo de grupos, 13
- equação baricêntrica, 52
- escada, 106
- escada dupla, 106

estrela, 24
 Ext, 47
 fibra
 geodésica, 49
 paralela, 49
 função de incidência, 21
 geodésica, 23
 geodésica forte, 49
 gerador, 11
 grade, 34
 grafo, 21
 base, 42
 conexo, 23
 de voltagem, 42
 derivado, 42
 fibra, 127
 infinito, 22
 k-regular, 22
 linear, 22
 quociente, 39
 simples, 22
 vértice-transitivo, 28
 grau de um vértice, 21
 grupo, 7
 abeliano, 7
 alternado, 9
 cíclico, 12
 comutativo, 7
 de correlação, 114
 de espaço, 38
 de permutações, 9
 finitamente primitivo, 100
 finito, 7
 livre, 14
 livre abeliano, 12
 primitivo, 16
 quociente, 11
 simétrico, 8
 transitivo, 15
 homomorfismo de grafos, 27
 homomorfismo de grupos, 13
 identidade de um grupo, 7
 imagem, 13
 índice, 10
 isometria, 35
 isomorfismo de grafos, 27
 isomorfismo de grupos, 13
 laço, 21
 matriz
 adjacência, 96
 ciclo-cociclo, 55
 diagonal de graus, 96
 Laplaciana, 96
 voltagem, 55
 monomorfismo de grupos, 13
 multiconjunto, 103
 núcleo, 13
 número ciclomático, 26
 órbita, 10
 à direita, 10
 à esquerda, 10
 ordem de um elemento, 12
 ordem de um grupo, 7
 orientação, 21
 palavra, 14
 partição
 equitável, 103
 equivoltagem, 104
 passeio, 23
 comprimento de um, 23
 periodicidade, 38
 permutação, 8
 ímpar, 9

- composição de, 9
- limitada, 148
- par, 9
- paridade de uma, 9
- peso de uma aresta, 52
- ponto fixo, 11
- pontos
 - translacionalmente equivalentes, 35
- posto, 12
- procedimento base-derivado, 45
- produto
 - direto, 17
 - entrelaçado, 17
 - semidireto, 17
 - subdireto, 18
- projeção
 - natural, 39
 - regular, 45
- rede, 32
 - cristalográfica, 38
 - instável, 53
 - minimal, 46
 - não cristalográfica, 39
 - p-periódica, 38
 - reticular, 126
 - tipo de uma, 138
- redes
 - isomegéticas, 55
- relação, 14
- relator, 14
- representação, 34
 - baricêntrica, 52
 - limitada, 96
 - limitada por segmentos, 96
 - p-periódica, 39
 - pseudo-baricêntrica, 72
- retículo, 36
 - aresta-, 37
 - ponto-, 36
 - segmento-, 36
 - vértice-, 37
- segmentos
 - translacionalmente equivalentes, 35
- sistema de imprimitividade, 15
 - periódico, 64
 - trivial, 16
- subconjunto gerado, 11
- subgrafo, 22
 - fundamental, 41
 - geodesicamente completo, 47
 - induzido por arestas, 22
 - induzido por vértices, 22
- subgrupo, 7
 - comutador, 14
 - diagonal, 17
 - estabilizador, 15
 - estabilizador pontual, 15
 - maximal, 7
 - não trivial, 7
 - normal, 9
 - próprio, 7
- translação, 35, 37
- transposição, 9
- triplo hcb, 115
- triplo sql, 108
- ULD, 107
- vértices
 - adjacentes, 21
 - incidentes a uma aresta, 21
 - independentes, 21
- vetor representação, 96
- voltagem, 42
 - atribuição de, 42