

# Grupos Cristalográficos e Empacotamentos de Esferas

Marcelo Firer e Trajano Nobrega Pires

Janeiro de 2000

O 18º problema proposto por Hilbert no Congresso Internacional de Matemática de 1900 coloca duas questões, dois desafios, a serem enfrentados pela comunidade matemática. Iremos tratar aqui do primeiro problema, sobre grupos cristalográficos, e da parte do segundo que se refere especificamente ao problema de empacotamento de esferas.

Cada uma das duas questões é tratada em uma seção, ambas as seções estruturadas de modo similar.

Como optamos por escrever um texto dirigido a um público razoavelmente amplo, pessoas com alguma formação matemática (como alunos em final de graduação) mas sem conhecimento específico da área, fazemos uma introdução relativamente longa ao tema, procurando introduzir os conceitos necessários de forma clara e precisa (duas qualidades que nem sempre coincidem). Esperamos com isto que este público amplo possa ao menos entender a formulação matemática dos problemas, mesmo que tenha dificuldade em acompanhar os resultados posteriores. Para não truncarmos este trabalho e torná-lo demasiadamente técnico, apresentamos os conceitos e resultados no corpo do texto, evitando um estilo existente de textos matemáticos pautado por itens declaratórios (Teorema 2.X, Lema Y.Z, Definição A.B.C, etc...). Infelizmente, por tratarmos de forma bastante breve questões bastante complexas e profundas, não pudemos evitar as tradicionais (e geralmente deploráveis) expressões do tipo "é fácil demonstrar que...". No entanto, tentamos ser criteriosos neste aspecto e sempre que tivemos dúvidas sobre a demonstração ser ou não realmente fácil, procuramos indicar um caminho para demonstrá-la ou indicar uma referência bibliográfica adequada e acessível. Após esta introdução, tentamos traçar um pequeno apanhado de alguns tópicos relacionados às questões, diferenciando os resultados conhecidos na época da realização do Congresso dos desenvolvimentos posteriores. Passamos longe da pretensão de esgotar o assunto, de fazer uma resenha

abrangente sobre as áreas em questão, mas estas existem e estão listadas nas referências bibliográficas.

O primeiro problema abordado, a da existência de um número finito de grupos cristalográficos, é uma questão resolvida, o que nos permitiu escrever uma seção com um final bem definido. Sugerimos como referência bastante atual o artigo [13]. Aqueles que preferem uma abordagem menos técnica, um pouco heurística, sugerimos o clássico *Geometry and Imagination* ([20]), ou o também excelente *Regular Figures* ([15]).

O segundo problema abordado, empacotamento de esferas, é ainda um problema em aberto, uma área muito ativa de trabalho, e por isto a seção correspondente termina de modo um pouco abrupto, com reticências. As referências fundamentais para os interessados no assunto são o enciclopédico tratado *Sphere Packings, Lattices and Groups* ([11]) e o menos abrangente mas bem mais didático *Algebraic-Geometric Codes* ([32]). Para um bom e enxuto apanhado sobre empacotamentos e questões correlatas, remetemos o leitor a referência [16]. Novamente, uma abordagem menos técnica pode ser encontrada em [20] ou [15].

Finalmente, queremos agradecer o convite de Sérgio Nobre de escrevermos este texto, apesar de o desafio ter sido bem maior do que o esperado, pois John Milnor já havia escrito um trabalho sobre os desenvolvimentos relacionados a estas questões ([26]) e, apesar de num certo sentido seu trabalho ter sido uma referência inicial para este texto, tivemos de nos esforçar para que este não fosse uma sombra.

## 1 Grupos Cristalográficos

Consideramos  $\mathbb{R}^n$  com um produto interno. A menos da escolha de base, podemos considerar que este produto é dado por

$$\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n.$$

Com a distância proveniente deste produto interno

$$d(x, y) = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + \dots + (x_n - y_n)^2}$$

temos um espaço euclidiano usual, que denotaremos por  $\mathbb{E}^n$ , sempre que o estivermos considerando como um espaço métrico.

Vamos começar estudando o grupo de isometrias de  $\mathbb{E}^n$ .

O grupo ortogonal  $O(n)$  é definido como o grupo de transformações lineares que preservam o produto interno:

$$O(n) = \{A \in GL(n) \mid \langle Ax, Ay \rangle = \langle x, y \rangle, \forall x, y \in \mathbb{E}^n\}.$$

Como preservam o produto interno, é realmente fácil demonstrar que as transformações ortogonais agem em  $\mathbb{E}^n$  como isometrias. Observe que a origem  $o \in \mathbb{E}^n$  é fixa por todas as transformações de  $O(n)$ . Se assumirmos que uma isometria de  $\mathbb{E}^n$  é determinada pela imagem de  $n + 1$  pontos, não é muito difícil demonstrar que estas são todas as isometrias que mantêm  $o$  fixo. Para fazê-lo, basta considerarmos uma família especial de transformações ortogonais, as reflexões em subespaços vetoriais (que algebricamente são caracterizadas como transformações tais que  $A^2 = \text{Id}$ , ou, equivalentemente, transformações diagonalizáveis com um autovalor  $\pm 1$ ).

Outro grupo de isometrias de  $\mathbb{E}^n$  é o grupo das translações, que identificamos com  $\mathbb{R}^n$ : a um vetor  $v \in \mathbb{R}^n$  associamos a translação  $T_v(x) = x + v$ . Observe que, as translações não possuem pontos fixos.

Novamente, considerando que uma isometria de  $\mathbb{E}^n$  é determinada pela imagem de  $n + 1$  pontos, é possível mostrar que o produto semi direto  $O(n) \triangleright \mathbb{R}^n$  é o grupo de todas as isometrias de  $\mathbb{E}^n$  e como tal, o denotaremos apenas por  $\text{Is}^n$ .

Como conjunto,  $\text{Is}^n$  nada mais é que o produto cartesiano  $O(n) \times \mathbb{R}^n$  enquanto a operação de grupo é definida por  $(A, v) * (B, w) = (AB, v + Aw)$ . A ação de  $\text{Is}^n$  em  $\mathbb{E}^n$  é dada por  $(A, v)(x) = Ax + v$ . Logo, um elemento da forma  $(A, 0)$  é chamado de isometria linear enquanto um elemento da forma  $(\text{Id}, v)$  de translação por um vetor  $v$ . Chamamos a função

$$\begin{aligned} &: \text{Is}^n \times \mathbb{R}^n = (O(n) \triangleright \mathbb{R}^n) \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{E}^n \\ &: (g, x) = ((A, v), x) \mapsto g(x) = A(x) + v \end{aligned}$$

de ação do grupo  $\text{Is}^n$  em  $\mathbb{E}^n$  pois esta aplicação é compatível com a estrutura do grupo  $\text{Is}^n$ , ou seja,  $g(h(x)) = (gh)(x)$  e  $e(x) = x$ , para todo  $x \in \mathbb{E}^n$ , onde  $g, h \in \text{Is}^n$  e  $e = (\text{Id}, 0)$  é a identidade do grupo.

Dado um subgrupo  $\Gamma \subset \text{Is}^n$ , denotamos por

$$\Gamma(x) = \{g(x) \mid g \in \Gamma\}$$

a órbita de  $x \in \mathbb{E}^n$  por  $\Gamma$ .

Estamos interessados em *subgrupos discretos* de  $\text{Is}^n$ . Para evitarmos discorrer sobre a estrutura de grupo de Lie de  $\text{Is}^n$ , consideramos  $O(n)$  como subconjunto de  $\mathbb{R}^{n^2}$  e dizemos que um subgrupo  $\Gamma \subset \text{Is}^n$  é discreto se for discreto quando considerado como subconjunto de  $\mathbb{R}^{n^2} \times \mathbb{R}^n$ . Em termos matriciais, se identificarmos uma transformação ortogonal com uma matriz (fixada uma base de  $\mathbb{R}^n$ ), dizer que uma família de transformações ortogonais converge é equivalente a dizer que cada uma das sequências formadas pelas entradas das matrizes é convergente.

Observemos antes de tudo que  $\Gamma \subset \text{Is}^n$  ser discreto é equivalente a termos as órbitas  $\Gamma(x)$  da ação de  $\Gamma$  em  $\mathbb{E}^n$  discretas. De fato, se  $(A_n, v_n)$  converge para  $(A, v)$ , então  $(A_n, v_n)(x) = A_n(x) + v_n$  obviamente converge para  $A(x) + v$ . Recíprocamente, suponha que para algum  $x \in \mathbb{E}^n$ ,  $A_n(x) + v_n$  convirja para um ponto  $y$ . Como  $O(n)$  é compacto, podemos considerar  $A_n$  convergente (se não o for, tomamos subsequência convergente) para algum  $A \in O(n)$ , donde segue que  $v_n$  converge para  $y - A(x)$ .

Vamos tentar entender um pouco sobre os grupos discretos de  $\text{Is}^n$ , os principais objetos de estudo desta seção.

Obviamente, subgrupos discretos de  $O(n)$  são sempre finitos, pois  $O(n)$  é compacto. Já os subgrupos discretos de  $\mathbb{R}^n$  são sempre combinações lineares inteiras de um conjunto linearmente independente de vetores. De fato, se considerarmos subgrupo discreto  $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ , tomamos para cada  $v \in \Lambda$  um vetor  $v'$  de  $\Lambda$  da forma  $\alpha v, \alpha \in \mathbb{R}$  de norma mínima. Dentre todos estes vetores, consideramos um conjunto linearmente independente maximal  $v'_1, \dots, v'_k$  e obtemos que

$$\Lambda = \{ \alpha_1 v'_1 + \dots + \alpha_k v'_k \mid \alpha_1, \dots, \alpha_k \in \mathbb{Z} \}.$$

Não é difícil constatar que  $\mathbb{R}^n / \Lambda$  é difeomorfo a  $T^k \times \mathbb{R}^{n-k}$  onde  $T^k = S^1 \times \dots \times S^1$  é um toro  $k$ -dimensional (basta completarmos a base e considerarmos isomorfismo linear que leve  $v'_1, \dots, v'_k, \dots, v'_n$  nos vetores  $e_1 = (1, 0, \dots, 0), \dots, e_n = (0, \dots, 0, 1)$ , respectivamente). Em particular,  $\mathbb{R}^n / \Lambda$  é compacto se e somente se  $k = n$ , ou seja, se  $\Lambda$  possui  $n$  vetores linearmente independentes. Neste caso, dizemos que  $\Lambda$  é um *reticulado* (uniforme) de  $\mathbb{R}^n$ .

Observe que, apesar de apenas os subgrupos finitos de  $O(n)$  serem discretos, podemos ter subgrupos discretos de  $\text{Is}^n$  contendo elementos da forma  $(A, T_v)$  com  $\text{Id} \neq A \in O(n)$ . Considere por exemplo o subgrupo  $\Gamma$  gerado pelo elemento

$$(A, T) = \left( \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, T_{(1,0)} \right).$$

Temos então que

$$\begin{aligned} (A, T)^n &= ((-1)^n A, T^n) \\ &= \left( \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (-1)^n \end{pmatrix}, T_{(n,0)} \right) \end{aligned}$$

é discreto e infinito. Como  $(A, T)^n(x, y) = (x + n, (-1)^n y)$ , é fácil ver que  $(A, T)^n$  não possui pontos fixos, para  $n \neq 0$ .

Refinamos agora nosso interesse, considerando apenas os subgrupos discretos  $\Gamma \subset \text{Is}^n$  com quociente  $\text{Is}^n / \Gamma$  compacto.

Dado subgrupo discreto  $\Gamma \subset \text{Is}^n$ , consideramos o espaço quociente  $\mathbb{E}^n/\Gamma$ , onde dizemos que  $x \sim y$  se e somente se existe  $\gamma \in \Gamma$  tal que  $\gamma(x) = y$ . Consideramos no quociente a topologia que torna a projeção

$$\begin{aligned} \pi &: \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n/\Gamma \\ &: x \mapsto x\Gamma \end{aligned}$$

contínua e aberta, ou seja, os abertos de  $\mathbb{E}^n/\Gamma$  são da forma  $\pi(U) = \{x\Gamma \mid x \in U\}$ , onde  $U \subset \mathbb{E}^n$  é aberto. Sendo  $\Gamma$  discreto, este é um subgrupo fechado e obtemos que o quociente  $\mathbb{E}^n/\Gamma$  é um espaço Hausdorff.

Podemos identificar as  $\mathbb{E}^n$  com o espaço quociente  $\text{Is}^n/O(n)$ . Considerando-se esta identificação, temos que a aplicação

$$\begin{aligned} p &: \text{Is}^n/\Gamma \rightarrow (\text{Is}^n/O(n))/\Gamma \approx \mathbb{E}^n/\Gamma \\ &: g\Gamma \mapsto \Gamma(g(O(n))) \end{aligned}$$

é uma aplicação contínua com fibras (imagem inversa de um ponto) compactas (difeomorfas a  $O(n)$ ). Obtemos assim que  $\text{Is}^n/\Gamma$  é compacto se e somente se  $\mathbb{E}^n/\Gamma$  também o for. Obtemos então duas definições equivalentes para grupos cristalográficos:

**Definição 1.0.1** *Um grupo cristalográfico é um subgrupo  $\Gamma \subset \text{Is}^n$  satisfazendo uma das condições equivalentes:*

1.  $\Gamma$  é discreto e  $\text{Is}^n/\Gamma$  é compacto.
2. As órbitas de  $\Gamma$  em  $\mathbb{E}^n$  são discretas e  $\mathbb{E}^n/\Gamma$  é compacto.

Para entender a referência a cristais na definição acima, devemos estudar a ação de um grupo cristalográfico  $\Gamma$  em  $\mathbb{E}^n$ . Suponha que  $\Gamma$  possua um elemento de ordem finita  $g$ , e consideremos um subgrupo finito maximal  $\Gamma' \subset \Gamma$ . Escolhemos um ponto qualquer  $p \in \mathbb{E}^n$  e encontramos o centro de massa da órbita  $\Gamma'(p)$ :

$$p_0 = \frac{1}{|\Gamma'|} \sum_{g \in \Gamma'} g(p),$$

onde  $|\Gamma'|$  é a ordem de  $\Gamma'$  e a soma é a soma usual de vetores. Temos então que  $p_0$  é um ponto fixo por  $\Gamma'$  ([13, Teorema 8]). Construímos então a *célula fundamental* de  $\Gamma$  centrada em  $p_0$ ,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_{p_0}(\Gamma) = \{x \in \mathbb{E}^n \mid d(x, p) \leq d(x, g(p)), \forall g \in \Gamma, g(p) \neq p\}.$$

Este conjunto, também chamado de polítopo fundamental, tem diversas propriedades interessantes. Se notarmos que  $\mathcal{P}$  é a intersecção dos semi-espacos determinados pela equação  $d(x, p) \leq d(x, g(p))$ , todos eles contendo o ponto  $p$ , constatamos imediatamente que este é um conjunto fechado, de interior não vazio e convexo. Mais ainda, ele pode ser caracterizado como um polítopo, pois o seu bordo é formado por regiões de parte dos hiperplanos definidos pelas equações  $d(x, p) = d(x, g(p))$ . Temos ainda que podemos ladrilhar  $\mathbb{E}^n$  com cópias isométricas de  $\mathcal{P}$  por elementos de  $\Gamma$ , ou seja  $\mathbb{E}^n = \cup_{g \in \Gamma} g(\mathcal{P})$  e dadas duas cópias  $g(\mathcal{P})$  e  $h(\mathcal{P})$ , temos que ou bem estas coincidem ou se interceptam no máximo em seus bordos.

No caso em que  $n = 3$ , cada um destes ladrilhos formam uma estrutura semelhante àquelas em que se organizam as moléculas de um cristal, formando uma estrutura cristalina. Por analogia ao caso tri-dimensional, adotou-se o termo para dimensões arbitrárias.

Pelo visto acima, temos um ladrilhamento de  $\mathbb{E}^n$  e a ação de  $\Gamma$  respeita a estrutura de ladrilhamentos. Da forma como estamos considerando os ladrilhos, lisos e sem qualquer ornamento, a associação entre grupos cristalográficos e ladrilhamentos não é biunívoca, pois a grupos distintos podem estar associados ladrilhamentos semelhantes. Ao grupo cristalográfico  $\Gamma$  gerado pelos elementos  $(\text{Id}, (1, 0))$  e  $(\text{Id}, (0, 1))$ , um grupo isomorfo a  $\mathbb{Z}^2$ , associamos a célula fundamental centrada em  $o$ ,

$$\{(x, y) \in \mathbb{E}^2 \mid |x|, |y| \leq 1/2\}.$$

É fácil constatar que a mesma célula fundamental está associada ao grupo  $\Gamma'$ , gerado pelos elementos  $\left(\left(\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, (0, 1)\right)\right)$  e  $\left(\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, (1, 0)\right)\right)$ . Observemos que, apesar destes grupos determinarem o mesmo ladrilhamento, eles não são isomorfos, pois o primeiro é abeliano e o segundo não o é, bastando verificar que os dois geradores não comutam. Esta ambiguidade na associação de ladrilhos pode ser resolvida se adicionarmos ornamentos aos ladrilhos. A figura abaixo ilustra de modo claro como a disposição dos ladrilhos ornamentados distingue os grupos  $\Gamma$  e  $\Gamma'$  de modo que, ao considerarmos ladrilhos ornamentados, podemos definir um grupo cristalográfico como o grupo de simetrias do ladrilhamento e obter, para grupos não isomorfos, ladrilhamentos ornamentados essencialmente distintos.

Apriori, a associação entre grupos cristalográficos e células fundamentais também não está unicamente definida no sentido contrário. Consideremos por exemplo os grupos cristalográficos  $\Gamma = \{\text{Id}\} \times \mathbb{Z}^2$  e  $\Gamma' = \{\text{Id}\} \times (k\mathbb{Z})^2$ . Estes grupos são não apenas isomorfos, mas conjugados pelo elemento  $g = \left(\left(\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}, (0, 0)\right)\right)$  pertencente ao grupo das transformações afins  $\text{Af}(n) =$

$GL(n) \triangleright \mathbb{R}^n$ , ou seja,  $\Gamma = g^{-1}\Gamma'g$ . Suas células fundamentais centradas em  $o$  são respectivamente

$$\{(x, y) \in \mathbb{E}^2 \mid |x|, |y| \leq 1/2\} \text{ e } \{(x, y) \in \mathbb{E}^2 \mid |x|, |y| \leq |k|/2\}.$$

Apesar de não serem iguais, estas células fundamentais não são essencialmente distintas, pois são imagens homotéticas uma da outra. Assim, assumimos a seguinte definição:

**Definição 1.0.2** *Dois grupos cristalográficos  $\Gamma$  e  $\Gamma'$  são equivalentes se forem conjugados no grupo afim  $\text{Af}(n) = GL(n) \triangleright \mathbb{R}^n$ , ou seja, se existir transformação afim tal que  $\Gamma' = g^{-1}\Gamma g$ . Dois grupos cristalográficos são ditos essencialmente distintos se não forem equivalentes.*

Podemos enfim apresentar o problema proposto por Hilbert. Para isto, nada melhor do que citar suas palavras:

*"No espaço euclidiano  $n$ -dimensional, existe apenas um número finito de grupos de movimentos (rígidos) essencialmente distintos?"*

Na próxima seção vamos expor os principais resultados conhecidos em 1900 sobre o este problema proposto por Hilbert. Na seção subsequente, vamos apresentar os principais desenvolvimentos posteriores.

Antes disto, achamos interessante fazer uma observação sobre a relação entre grupos cristalográficos e a classificação de variedades compactas planas (detalhes podem ser encontrados em [34, capítulo 3]). Se  $\Gamma$  for um grupo cristalográfico que age em  $\mathbb{E}^n$  sem pontos fixos, então, a projeção  $\pi : \mathbb{E}^n \rightarrow \mathbb{E}^n/\Gamma$  é uma aplicação de recobrimento. Isto nos permite dotar o espaço quociente de uma métrica riemanniana que o torna localmente isométrico ao espaço euclidiano  $\mathbb{E}^n$ . Obviamente, a variedade  $\mathbb{E}^n/\Gamma$  é compacta, pois  $\Gamma$  é cristalográfico. Variedades com esta propriedade são chamadas de variedades planas. Uma das formas de entender o adjetivo "plano" é notar que, dados 3 pontos suficientemente próximos, estes determinam um triângulo euclidiano, ou seja, um triângulo cuja soma dos ângulos é  $\pi$ .

Esta associação entre grupos cristalográficos e variedades compactas planas pode ser revertida: Dada variedade plana compacta  $n$ -dimensional  $M^n$ , temos que seu grupo fundamental  $\Gamma = \pi_1(M)$ , agindo como transformações no espaço de recobrimento, é um subgrupo discreto de  $\text{Is}^n$ , com  $\text{Is}^n/\Gamma$  compacto. Mais ainda, a associação entre variedades compactas planas e grupos cristalográficos sem pontos fixos é biunívoca, no sentido de termos dois grupos  $\Gamma$  e  $\Gamma'$  essencialmente equivalentes se e somente se os quocientes

$\mathbb{E}^n/\Gamma$  e  $\mathbb{E}^n/\Gamma'$  forem variedades (globalmente) isométricas, a menos de um re-escalamento da métrica, ou seja, ao menos de multiplicarmos a função distância por uma constante.

## 1.1 Grupos Cristalográficos Antes de 1900

Em 1900, o conhecimento sobre grupos cristalográficos restringia-se aos casos de dimensão 2 e 3. Apesar de restrito na dimensão, estes casos eram conhecidos em profundidade.

O caso bi-dimensional já havia sido explorado por artistas que não tinham qualquer preocupação matemática intencional. Este aparece na forma de padrões regulares em tapeçarias, ladrilhos de parede, de pisos. Já no Egito antigo apareciam diversos destes padrões, e no castelo mourisco de Alhambra, em Granada, aparecem 17 tipos distintos de ladrilhos. Não devemos e "difícilmente podemos sub-estimar a profundidade da imaginação e criatividade geométrica refletidas nestes padrões", de acordo com as palavras de Weyl ([33]). Para termos uma idéia da engenhosidade matemática implicitamente envolvida na arte de ornamentos regulares, basta dizermos que a estes 17 padrões que aparecem na Alhambra correspondem todos os grupos cristalográficos do plano euclidiano.

A primeira demonstração da classificação dos 17 grupos cristalográficos bi-dimensionais foi feita em 1890 pelo matemático russo E. S. Fedorov. Posteriormente esta foi redescoberta por diversos outros matemáticos, entre os quais Fricke e Klein (1897), Pólya (1924) e Niggli (1924). O próprio Hilbert retomou o tema, com um tratamento bastante elementar, no famoso livro de divulgação que escreveu com Cohn-Vossen ([20]). Esta demonstração baseia-se no estudo de três casos distintos, a saber:

1. Existe um ponto fixo pelo grupo.
2. Não existe um ponto fixo, mas existe uma reta invariante pela ação do grupo.
3. Não existe nem ponto nem reta do plano invariante pelo grupo.

Uma esboço conciso desta demonstração pode ser encontrada em diversos textos acessíveis ([20], [1]). Na figura abaixo pode-se encontrar os ladrilhos ornamentados correspondentes aos 17 grupos.

Já o estudo do caso tri-dimensional é bem mais complicado e é inevitável usar instrumentos da teoria abstrata de grupos. No entanto, existe apenas um número finito de grupos cristalográficos de dimensão 3. Dado grupo cristalográfico  $\Gamma$ , podemos considerar dois subgrupos distinguidos, que de

certo modo determinam quais são os elementos de ordem finita e os elementos de ordem infinita de  $\Gamma$ :

1. Escolhemos um subgrupo abeliano livre maximal  $\Gamma_T$ , um grupo de translações maximal. Este grupo deve ser gerado por 3 vetores linearmente independentes.
2. Escolhemos um ponto  $x \in \mathbb{E}^3$  fixo por algum elemento de  $\Gamma$  distinto da identidade, e que seja baricentro de uma célula fundamental. Consideramos o subgrupo de torção determinado por  $x$ , o estabilizador  $\Gamma' = \{g \in \Gamma | g(x) = x\}$ , um subgrupo finito maximal não vazio (Se  $\Gamma$  não possuir elementos de ordem finita, obtemos  $\Gamma' = \{\text{Id}\}$ ).

O primeiro passo para o estudo dos grupos cristalográficos de dimensão 3 é o estudo de todos os possíveis subgrupos que possam ser a parte de translações e a parte de torção de um grupo cristalográfico  $\Gamma$ .

Começemos com os grupos de translações. Tal grupo deve ser um grupo discreto de  $\mathbb{R}^3$ , gerados por 3 vetores linearmente independentes. Se considerarmos um reticulado gerado por vetores  $u, v$  e  $w$ , temos 6 grandezas a considerar: as normas dos vetores,  $|u|, |v|$  e  $|w|$  e os ângulos entre estes vetores,  $\angle(u, v), \angle(v, w)$  e  $\angle(w, u)$ . Existem sete classes de reticulados não equivalentes (não conjugados por elementos de  $GL(n) \triangleright \mathbb{R}^n$ ) que podem ser classificados de acordo com os ângulos e com a razão dupla  $|u| : |v| : |w|$ . A partir destes reticulados, considerando-se reticulados gerados por elementos da forma  $\{u, v, (v+w)/2\}, \{u, v, (v+w)/2\}, \{(u+w)/2, v, w\}, \{u, (v+w)/2, w\}, \{(u+v+w)/2, v, w\}$  e  $\{(u+w)/2, (v+u)/2, (w+v)/2\}$ , obtém-se um total de 14 reticulados de tipo distinto. Estes reticulados estão ilustrados na figura abaixo, podendo ser estendidos a todo o plano apenas por sucessivas translações determinadas pelos pontos dos reticulados.

Estes 14 reticulados foram determinados, pela primeira vez, pelo cristalógrafo A. Bravais ([5]) em 1850.

Se passarmos a parte de torção, estamos na realidade tratando de conhecer os subgrupos discretos de  $O(n)$  que aparecem como parte de torção de um grupo cristalográfico. Estes grupos podem ser determinados considerando-se que toda isometria linear de  $\mathbb{E}^3$  possui um subespaço unidimensional invariante e, por ser isometria, o complemento ortogonal deste subespaço também será. Estes grupos foram classificados em 1830 pelo mineralogista C. Hessel ([18]): são ao todo 32 grupos, distintos a menos de conjugação em  $O(3)$ . Destes, 11 contém apenas transformações próprias (distintas de reflexões), enquanto os outros 21 contém reflexões.

Cada um destas classes de conjugação representa o que chamamos de classe de cristal. As classes de cristais determinam uma relação de equivalência,

obviamente mais fraca que a introduzida em 1.0.2, ou seja, existem grupos pertencentes a mesma classe de cristal que não são equivalentes. Em outras palavras, cada uma destas 32 classes de cristal contém diversos grupos cristalográficos essencialmente distintos. Hilbert retomou este tema no livro que escreveu com Cohn-Vossen, onde apresentou as 11 primeiras classes [20, seo 13]. Todas as 32 classes de cristal são encontradas por exemplo, em [12]. O estudo destas classes, combinado com os 14 reticulados de Bravais, foi o ponto de partida para a classificação dos grupos cristalográficos, levada a cabo por C. Jordan ([22]), que em 1869 classificou os grupos contendo apenas elementos que preservam a orientação e por E. S. Fedorov ([14]) que, em 1889 classificou todos os grupos cristalográficos: 230 no total. Dentre estes, 165 contém reflexões e 65 apenas transformações próprias. Os detalhes da demonstração podem ser encontrados no artigo fundamental de E.S. Fedorov ([14]), ou nos trabalhos de Buckhardt ([9]) e Wyckoff ([35]).

## 1.2 Desenvolvimentos Posteriores a 1900

A pergunta feita por Hilbert sobre grupos cristalográficos foi respondida de forma positiva, ou seja, em um espaço euclidiano  $n$ -dimensional existe apenas um número finito de grupos cristalográficos essencialmente distintos.

A resposta foi dada pelo matemático Ludwig Bieberbach<sup>1</sup>, em uma série de dois artigos publicados em 1911 e 1912 ([3] e [4]).

O primeiro passo foi demonstrar que, de fato, um grupo cristalográfico  $\Gamma$  de dimensão  $n$  deve conter  $n$  translações determinadas por  $n$  vetores linearmente independentes.

Se considerarmos o subgrupo das translações  $\Lambda = \Gamma \cap \{\text{Id}\} \times \mathbb{R}^n$ , temos que este é um subgrupo abeliano finitamente gerado. A afirmação acima quer dizer apenas que  $\Lambda$  possui um conjunto de geradores linearmente independentes que formam uma base de  $\mathbb{E}^n$ , visto como espaço vetorial. Além disto, este é um subgrupo abeliano livre maximal de índice finito e normal em  $\Gamma$ . Dito de outra forma, existe sequência exata curta

$$1 \longrightarrow \mathbb{Z}^n \xrightarrow{i} \Gamma \longrightarrow \phi \longrightarrow 1$$

com  $\phi = \Gamma/i(\mathbb{Z}^n)$  grupo finito.

Ainda mais, ao considerarmos a ação de  $\phi$  em  $\mathbb{Z}^n$  por automorfismos internos, obtemos uma representação fiel de  $\phi$  em  $GL(n, \mathbb{Z})$ . Dito em outras palavras, se considerarmos um conjunto minimal de geradores de  $\Lambda$ , obtemos uma base de  $\mathbb{E}^n$  e relativa a qualquer uma destas bases, as componentes em

---

<sup>1</sup>Notas biográficas, não elogiosas sobre as posturas políticas de Bieberbach, podem ser encontradas em [25].

$O(n)$  de  $\Gamma$  está contida em  $GL(n, \mathbb{Z})$ , ou seja, a matriz de um elemento de  $\Gamma \cap O(n)$  possui todas as entradas inteiras.

Baseado em um resultado de Camille Jordan (que tentara classificar os grupos cristalográficos, [22]), o qual afirma que, dado  $n > 0$  existe inteiro positivo  $\mu(n)$  tal que todo grupo finito  $\Gamma \subset O(n)$  possui subgrupo abeliano normal de índice menor que  $\mu(n)$ , Bieberbach pode responder a questão feita por Hilbert, pouco mais de uma década antes:

**Teorema 1.2.1** *Dado inteiro  $n > 0$ , existe um número finito de grupos cristalográficos essencialmente distinto de dimensão  $n$ . Mais ainda, dois grupos cristalográficos são isomorfos se forem conjugados por um elemento de  $Af(n)$ .*

Demonstrado este resultado, abre-se o desafio de tentar encontrar limitantes ótimos para a quantidade de grupos cristalográficos em uma dimensão dada e o desafio maior, tentar classificá-los. O grande avanço nesta direção foi obtido por Brown, Neubüser e Zassenhaus ([6], [7] e [8]). Considerando que, dada uma base do grupo de translações, as matrizes da parte finita de um grupo cristalográfico tem todos os coeficientes inteiros, os autores trataram de construir um algoritmo para determinar (a menos de conjugação), todos os subgrupos finitos de  $GL(n, \mathbb{Z})$ . Usando este algoritmo e uma série de resultados válidos para dimensão  $n$  arbitrária, eles conseguiram um feito notável, determinar todos os grupos cristalográficos de  $\mathbb{E}^4$ : são ao todo 4783, um número que expressa a dimensão do feito, mas também desestimula a tentativa de se classificar os grupos de dimensão maior ou igual a 5.

## 2 Empacotamento de Esferas

Uma das perguntas formuladas por Hilbert dentro do 18o problema refere-se a busca de solução ótima para o *problema de empacotamento de esferas*. Este era, e ainda é, um dos mais famosos problemas em aberto da matemática. De modo sintético podemos dizer que se busca o modo mais denso de se empacotar esferas de mesmo raio no espaço euclidiano  $n$ -dimensional. Fixamos  $R > 0$  e imaginamos uma família enumerável  $\mathcal{F} = \{B_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  de bolas abertas disjuntas, todas de mesmo raio  $R$ , distribuídas em  $\mathbb{E}^n$ . Tal arranjo de bolas é o que chamamos de *empacotamento de esferas*<sup>2</sup>. Como definir a densidade

---

<sup>2</sup>Na realidade, como estamos tratando do volume  $n$ -dimensional das bolas e não da superfície de seu bordo esférico, seria mais adequado utilizarmos o termo empacotamento de bolas, ou até mesmo empacotamento de "laranjas". Mantemos no entanto o termo "esferas", pois este já está consagrado na literatura. Também sobre o termo "empacotamento" existem divergências, sendo adotado, em francês, o termo "empilhamento".

de tal empacotamento? Consideramos em  $\mathbb{E}^n$  uma bola  $B_r = B_r(x_0)$  de centro  $x_0$  e raio  $r > 0$ . Temos então três definições razoáveis de densidade do empacotamento  $\mathcal{F}$  relativo a  $B = B_r(x_0)$ , expressas pela razão entre o volume de uma bola de raio  $r$  e respectivamente pelo volume das bolas que estão inteiramente contidas em  $B$ , pelo volume das bolas e pedaços de bolas contidos em  $B$  e pelo volume total das bolas que ao menos interceptam  $B$ :

$$\begin{aligned} d_{int}(\mathcal{F}, x_0, r) &= \frac{1}{Vol(B_r)} \sum_{\substack{S \in \mathcal{F} \\ S \subset B_r}} Vol(S) \\ &= \text{densidade interna de } \mathcal{F} \text{ relativa a } B_r \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{ext}(\mathcal{F}, x_0, r) &= \frac{1}{Vol(B_r)} \sum_{\substack{S \in \mathcal{F} \\ S \cap B_r \neq \emptyset}} Vol(S) \\ &= \text{densidade externa de } \mathcal{F} \text{ relativa a } B_r \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_{med}(\mathcal{F}, x_0, r) &= \frac{1}{Vol(B_r)} \sum_{S \in \mathcal{F}} Vol(S \cap B_r) \\ &= \text{densidade média de } \mathcal{F} \text{ relativa a } B_r. \end{aligned}$$

A priori sabemos apenas que

$$d_{int}(\mathcal{F}, x_0, r) \leq d_{med}(\mathcal{F}, x_0, r) \leq d_{ext}(\mathcal{F}, x_0, r)$$

e que

$$d_{med}(\mathcal{F}, x_0, r) \leq 1.$$

Observemos ainda que estas densidades medem, de algum modo, quantas bolas de raio  $R$  conseguimos colocar dentro de uma esfera dada, e temos que estas densidades dependem do centro e do raio da bola  $B_r$ . No entanto, se quisermos considerar a densidade em todo o espaço  $\mathbb{E}^n$ , devemos considerar bolas  $B_r(x_0)$  com raio arbitrariamente grande, ou seja, tomamos os limites das densidades, obtendo

$$\begin{aligned} d_-(\mathcal{F}, x_0) &= \liminf_{r \rightarrow \infty} d_{int}(\mathcal{F}, x_0, r) \\ &= \text{dens. inf. relativa } x_0 \\ d_+(\mathcal{F}, x_0) &= \limsup_{\lambda \rightarrow \infty} d_{ext}(\mathcal{F}, x_0, r) \\ &= \text{dens. sup. relativa } x_0 \end{aligned}$$

A posteriori, é possível mostrar que estas densidades na realidade independem da escolha do ponto base  $x_0$ , de modo que as denotamos apenas por  $d_-(\mathcal{F})$  e  $d_+(\mathcal{F})$ , respectivamente. Em situações bastante razoáveis, temos que as densidades superiores e inferiores de um empacotamento coincidem e chamamos de *densidade do empacotamento*  $\mathcal{F}$  ao valor comum  $d(\mathcal{F}) = d_-(\mathcal{F}) = d_+(\mathcal{F})$ . É a este sentido de densidade que Hilbert se refere ao perguntar:

*” Qual é o modo mais denso em que podemos arranjar no espaço um número infinito de sólidos de um mesmo formato, por exemplo esferas de mesmo raio ou tetraedros regulares de arestas dadas (ou com alguma posição prescrita), isto é, como é possível arranjar-los de modo que a razão entre o espaço preenchido e o espaço não preenchido seja tão grande quanto possível?”*

Estamos na realidade buscando uma constante  $d(n)$  e um arranjo  $\mathcal{F}_0(n)$  de esferas em  $\mathbb{E}^n$  tais que  $d(n) = d(\mathcal{F}_0(n)) \geq d(\mathcal{F})$ , para todo empacotamento  $\mathcal{F}$  em  $\mathbb{E}^n$ . Em sua generalidade, o problema era e ainda é extremamente difícil. Assim, para possibilitar alguma abordagem razoável, é comum considerar-se restrições do problema. A principal delas é limitar o universo dos arranjos de esferas a reticulados (1), ou seja, exigimos que os centros das esferas sejam exatamente os pontos de um subgrupo aditivo

$$\Lambda = \{\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n \mid \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{Z}\},$$

onde  $\{v_1, \dots, v_n\}$  é base de  $\mathbb{E}^n$ . Denotamos por  $\mathcal{F}_\Lambda$  tal arranjo. Com esta restrição, a definição de densidade torna-se bem mais simples.

Começamos construindo uma célula fundamental (1)  $\mathcal{P}_o(\Lambda)$  centrada no ponto base  $o \in \Lambda$  (célula que, neste contexto, é conhecida como domínio de Voronoi do reticulado). Esta célula é um politopo convexo, com volume  $\text{vol}(\mathcal{P}_o(\Lambda)) = \text{vol}(\mathcal{P}(\Lambda))$ , onde omitimos o ponto pois este volume depende exclusivamente do grupo  $\Lambda^3$ . Consideramos então a *distância mínima do reticulado*, a norma do menor vetor pertencente ao reticulado:

$$2R = \min_{\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{Z}} \{|\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n|\} \quad (1)$$

É imediato reparar que, se em cada ponto  $\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n$  do reticulado centrarmos uma bola de raio  $R$ , teremos uma família de bolas disjuntas,

---

<sup>3</sup>Este é um fato genérico sobre domínios fundamentais de grupos de isometrias. Uma demonstração que pode facilmente ser generalizada encontra-se por exemplo em [2, capítulo 9.1].

se interceptando no máximo em seus bordos, ou seja, um empacotamento de esferas. Mais ainda, como um reticulado é um conjunto discreto, existe um ponto  $v = \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n \in \Lambda$  tal que  $2R = |v|$ . Assim, dado  $\varepsilon > 0$ , se centrarmos nos pontos do reticulado bolas de raio  $R + \varepsilon$ , teremos as bolas  $B_{R+\varepsilon}(o)$  e  $B_{R+\varepsilon}(v)$  se interceptando em seus interiores. Assim, dentre todos os empacotamentos centrados nos pontos de  $\Lambda$ , aquele feito com bolas de raio  $R$  é ótimo, e é sempre este raio, determinado pela metade da distância mínima, que assumimos implicitamente como o raio das bolas de um empacotamento reticulado.

Observemos ainda que, nem sempre o vetor de norma mínima é um dos geradores escolhidos do grupo. Basta, por exemplo, considerarmos em  $\mathbb{E}^2$  o reticulado gerado pelos vetores  $v_k = (k, 1/k)$  e  $w_k = (-k, 1/k)$  e obtemos que

$$|v_k + w_k| = \frac{2}{k} < k < |v_k|, |w_k|.$$

Voltando ao ponto que paramos, para um empacotamento de esferas centradas em pontos de um reticulado, podemos considerar uma *densidade local*, dada pela razão entre o volume de uma bola de raio  $R$  e o volume de um domínio de Voronoi do reticulado. Note que, como todos os domínios de Voronoi tem o mesmo volume, a razão  $\text{vol}(B_R(o)) / \text{vol}(\mathcal{P}_o(\Lambda))$  independe do ponto base escolhido. Mais ainda, no caso de reticulados, temos que os limites das densidades relativas existem e são iguais a esta razão, ou seja,

$$\begin{aligned} d(\mathcal{F}_\Lambda) &= \frac{\text{vol}(B_R(o))}{\text{vol}(\mathcal{P}_o(\Lambda))} \\ &= \frac{\text{volumede esfera inscrita em } \mathcal{P}_o(\Lambda)}{\text{volumede } \mathcal{P}_o(\Lambda)}. \end{aligned}$$

No caso de buscarmos empacotamentos ótimos dentre os arranjos reticulados, obtemos em cada dimensão  $n$  um limitante superior  $d_L(n)$ , o supremo das densidades de empacotamentos reticulados. Obviamente,  $d_L(n) \leq d(n)$ . Denotaremos  $d(\mathcal{F}_\Lambda) = d(\Lambda)$  para enfatizar que o arranjo é determinado pelo reticulado (bastando tomar o raio das bolas como  $R$  definido em 1).

Esta restrição a arranjos reticulados é suficiente para começarmos a apresentar alguns resultados sobre o assunto, começando com aqueles já conhecidos em 1900 por Hilbert

## 2.1 Empacotamentos de Esferas Antes de 1900

Já no século XIX, era bem conhecida a relação entre reticulados, formas quadráticas e densidade de empacotamentos. De fato, dado reticulado  $\Lambda$

gerado por uma base de vetores  $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ , consideramos as coordenadas

$$\begin{aligned} v_1 &= (v_{11}, v_{12}, \dots, v_{1n}) \\ v_2 &= (v_{21}, v_{22}, \dots, v_{2n}) \\ &\dots \\ v_n &= (v_{n1}, v_{n2}, \dots, v_{nn}) \end{aligned}$$

destes vetores, obtendo a matriz  $n \times n$

$$M = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix}.$$

Podemos então caracterizar  $\Lambda$  como o conjunto de vetores

$$x = \xi M, \quad \xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{Z}^n$$

Considerando um elemento  $x = \xi M$  do reticulado, sua norma é dada por

$$\begin{aligned} \|x\|^2 &= (\xi M) (\xi M)^T \\ &= \xi (M M^T) \xi^T. \end{aligned}$$

A matriz  $A = M M^T$  determina uma forma quadrática em  $\mathbb{E}^n$ , bastando associarmos a um vetor  $v$  sua norma  $\|v\|^2 = v A v^T$ . Duas formas quadráticas  $A, B$  são equivalentes se existe  $c > 0$  tal que

$$\xi A \xi^T = c \xi B \xi^T, \quad \forall \xi \in \mathbb{E}^n$$

ou seja, se determinam, a menos de re-escalonamento, a mesma norma em  $\mathbb{E}^n$ . Esta é uma relação de equivalência entre formas quadráticas e denotamos por  $A \sim B$  a equivalência entre as formas  $A$  e  $B$ .

Se considerarmos um reticulado  $\Lambda = \{\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n \mid \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{Z}\}$ , temos que, para toda matriz ortogonal  $U \in O(n)$ , o reticulado

$$U(\Lambda) = \{\alpha_1 U(v_1) + \dots + \alpha_n U(v_n) \mid \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{Z}\}$$

é equivalente a  $\Lambda$  no sentido de os empacotamentos de esferas associados a  $\Lambda$  e  $U(\Lambda)$  terem a mesma densidade. De fato, se  $\mathcal{F} = \{B_i\}_{i \in \mathbb{N}}$  é uma família de esferas de raio  $R$  centradas nos pontos de  $\Lambda$ ,  $U(\mathcal{F}) = \{U(B_i)\}_{i \in \mathbb{N}}$  é arranjo de mesmo raio centrado em elementos de  $U(\Lambda)$ . Mais ainda, se  $\mathcal{P}_o(\Lambda)$  for domínio de Voronoi de  $\Lambda$ , então  $U(\mathcal{P}_o(\Lambda))$  é domínio de Voronoi

$\mathcal{P}_o(U(\Lambda))$ . Como  $U$  age em  $\mathbb{E}^n$  como isometria, temos que  $\text{vol}(\mathcal{P}_o(\Lambda)) = \text{vol}(\mathcal{P}_o(U(\Lambda)))$ , donde segue que  $d(\Lambda) = d(U(\Lambda))$ .

Algo semelhante ocorre se substituirmos  $\Lambda$  pelo reticulado

$$c\Lambda = \{c(\alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n) \mid \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{Z}\},$$

onde  $c$  é um real não nulo. De fato, estamos na verdade realizando uma homotetia de centro  $o$  e razão  $c$ . Esta homotetia leva o domínio de Voronoi  $\mathcal{P}_o(\Lambda)$  no domínio de Voronoi

$$\mathcal{P}_o(c\Lambda) = c\mathcal{P}_o(\Lambda) = \{cv \mid v \in \mathcal{P}_o(\Lambda)\}.$$

Estes domínios não tem o mesmo volume, mas como são homotéticos, temos que  $\text{vol}(\mathcal{P}_o(c\Lambda)) = c^n \text{vol}(\mathcal{P}_o(\Lambda))$ . O mesmo ocorre com a distância mínima: se  $R$  for a distância mínima de  $\Lambda$ , a de  $c\Lambda$  será  $cR$ . Assim, o volume da bola inscrita em  $\mathcal{P}_o(\Lambda)$  é  $c^n$  vezes o volume da inscrita em  $\mathcal{P}_o(c\Lambda)$ . Temos então que, também neste caso,  $d(\Lambda) = d(c\Lambda)$ .

É por este motivo que dizemos que dois reticulados  $\Lambda$  e  $\Omega$ , ao menos sob o ponto de vista de empacotamento de esferas e da função densidade, são equivalentes se existe  $c > 0$  e  $U \in O(n, \mathbb{R})$  tais que

$$\Lambda = cU(\Omega).$$

Novamente, temos uma relação de equivalência e é fácil mostrar (basta lembrar que  $U \in O(n)$  se e somente se  $UU^T = \text{Id}$ ) que, se  $A$  e  $B$  são formas quadráticas associadas respectivamente a reticulados  $\Lambda$  e  $\Omega$ , então

$$A \sim B \Leftrightarrow \Lambda \sim \Omega.$$

E, conforme acabamos de ver,  $\Lambda \sim \Omega \Rightarrow d(\Lambda) = d(\Omega)$ .

Foi utilizando esta relação entre empacotamentos, reticulados e formas quadráticas que, já no século XIX, chegou-se aos primeiros resultados sobre a questão depois proposta por Hilbert. Na época da realização do famoso Congresso Internacional de Matemática, já haviam sido computados diversos arranjos eficientes associados a reticulados e, para dimensão  $2 \leq n \leq 5$ , sabia-se que estes empacotamentos eram ótimos dentre os arranjos reticulados ([24]), ou seja, arranjos  $\mathcal{F}$  em que as bolas estão centradas nos pontos de algum reticulado (o caso  $n = 1$  é trivial, as bolas são intervalos e recobrimos a reta com densidade 1). A tabela abaixo mostra estes arranjos:

$n$	$\Lambda$	$d(\Lambda) = d_L(n)$		
2	$A_2$	$\pi/2\sqrt{3} \approx 0,9069$	Lagrange	1773
3	$A_3$	$\pi/3\sqrt{2} \approx 0,7404$	Gauss	1831
4	$D_4$	$\pi^2/16 \approx 0,6168$	Korkine-Zolotareff	1872
5	$D_5$	$\pi^2/15\sqrt{2} \approx 0,4652$	Korkine-Zolotareff	1877

Para esclarecer esta tabela, vamos descrever os reticulados exibindo um conjunto de geradores. Se considerarmos  $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$  base ortonormal de  $\mathbb{E}^n$ , teremos os seguintes conjuntos de geradores para os reticulados:

$\Lambda$	Geradores
$A_2$	$e_1, -\frac{1}{2}(e_1 + \sqrt{3}e_2)$
$A_3$	$e_1, e_2, -\frac{1}{2}(e_1 + e_2 + \sqrt{2}e_3)$
$D_4$	$e_1, e_2, -\frac{1}{2}(e_1 + e_2 + \sqrt{2}e_3), \frac{1}{\sqrt{2}}(e_3 + e_4)$
$D_5$	$e_1, e_2, -\frac{1}{2}(e_1 + e_2 + \sqrt{2}e_3), \frac{1}{\sqrt{2}}(e_3 + e_4), -\frac{1}{2\sqrt{2}}(2e_1 - 2e_3 - e_4 + e_5)$

Todos os vetores geradores são unitários. O reticulado  $A_2$  é gerado por dois vetores unitários, formando um ângulo de  $2\pi/3$ . Os domínios de Voronoi deste reticulado são hexágonos regulares. Para gerar o reticulado  $A_3$ , consideramos dois vetores unitários ortogonais entre si,  $v_1$  e  $v_2$  e escolhemos um terceiro vetor unitário  $v_3$ , formando um ângulo de  $2\pi/3$  com ambos  $v_1$  e  $v_2$ . Construímos  $D_4$  a partir de  $A_3$ , considerando os vetores  $v_1, v_2$  e  $v_3$  determinados anteriormente e tomando  $v_4$  como um vetor unitário ortogonal a  $v_1$  e  $v_2$  e formando ângulo de  $2\pi/3$  com  $v_3$ . Similarmente, consideramos os geradores  $v_1, v_2, v_3$  e  $v_4$  determinados anteriormente e adicionamos um vetor unitário  $v_5$  ortogonal a  $v_2, v_3$  e  $v_4$  e formando um ângulo de  $2\pi/3$  com  $v_1$ <sup>4</sup>.

Dada a dificuldade em resolver o problema, em determinar  $d_n$ , tratou-se, por um lado em buscar limitantes superiores para  $d(n)$  e  $d_L(n)$ , sem se poder determinar se estes são ou não ótimos e, por outro lado, limitantes inferiores para  $d_n$  e  $d_L(n)$ , sempre que possível através de exemplos. Um exemplo elementar de limitante é dado pela família de reticulados  $\Lambda_n$ , gerados pela base ortogonal  $e_1 = (c, 0, \dots, 0), \dots, e_n = (0, \dots, 0, c)$ . O domínio de Voronoi  $\mathcal{P}_o(\Lambda_n)$  é o cubo

$$\{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{E}^n \mid |x_i| \leq c/2, i = 1, \dots, n\}.$$

Este é um cubo de lado  $c$ , cuja bola inscrita é a bola centrada em  $o$  e de raio  $c/2$ . Assim, temos que o volume do domínio de Voronoi é  $c^n$ , enquanto o da bola inscrita é dado por  $c^n D_n$  ( $D_n$  uma constante).

Este por exemplo é o caso do limitante encontrado por Minkovski ([26]) em 1893 e demonstrado em 1905:  $d_L(n) \geq \zeta(n)/2^{n-1}$ , onde  $\zeta(n) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-n}$  é a função zeta de Riemman.

<sup>4</sup>Todos estes reticulados, assim como os conhecidos em dimensões maiores, estão associados a grupos de Coxeter-Weyl, grupos discretos finitos gerados por reflexões. Para determinar as reflexões geradoras dos grupos, basta considerarmos os hiperplanos ortogonais aos geradores do reticulado. Estes grupos estão classificados e os grupos de Weyl são usados na classificação das álgebras de Lie semi-simples. Citamos como referência os textos [21] para os grupos de Coxeter e [30] para os grupos de Weyl.

## 2.2 Empacotamentos de Esferas após 1900

Os textos que tratam de empacotamento de esferas costumam adjetivar de modo peremptório a situação em que se encontra o problema. Milnor ([26]) por exemplo, chama a situação de escandalosa e não temos como evitar dar-lhe razão. Em sua forma genérica, sem restrições a reticulados, obteve-se um único resultado definitivo e inquestionável: em 1910, A. Thue ([31]) demonstrou que o empacotamento associado ao reticulado  $A_2$  é ótimo dentre todos os empacotamentos possíveis no plano. Para o caso tri-dimensional, apesar de C. A. Rogers ([29]) afirmar em 1958 que "muitos matemáticos acreditam e todos os físicos sabem" que o empacotamento associado ao reticulado  $D_3$  é ótimo, apenas em 1998, S.P. Ferguson and T.C. Hales apresentaram uma demonstração desta afirmação. Mesmo assim, ainda não existe consenso sobre sua validade (uma breve discussão sobre o status desta demonstração pode ser encontrada em [28]).

Alguns outros avanços definitivos foram feitos por H. F. Blichfeldt que, entre 1925 e 1935 determinou os empacotamentos ótimos dentre os associados a reticulados até dimensão 8, permitindo-nos completar a tabela da seção anterior:

$n$	$\Lambda$	$d(\Lambda) = d_L(n)$		
6	$E_6$	$\pi^3/48 \approx \sqrt{30}, 3729$	Blichfeldt	1925
7	$E_7$	$\pi^3/105 \approx 0, 2953$	Blichfeldt	1926
8	$E_8$	$\pi^4/r84 \approx 0, 2536$	Blichfeldt	1935

Vemos assim que, nos cem anos transcorridos desde que o problema foi louvado por Hilbert, os avanços definitivos continuaram sendo escassos. Assim, tratou-se de ampliar o leque de questões relacionadas ao assunto. Começou-se a estudar empacotamentos em espaços não euclidianos (esferas e espaços hiperbólicos) e também arranjos de corpos congruentes, não necessariamente esféricos (mas geralmente com algum tipo de simetria). Considerou-se também empacotamentos de esferas com raios variáveis mas limitados ( $0 < a \leq R \leq b$ ) e categorias de arranjos que não são necessariamente reticulados, como por exemplo o arranjo de um determinado número de esferas em um domínio de Voronoi de um grupo cristalográfico que, posteriormente, é usado para recobrir-se o espaço.

Tratou-se também de buscar resultados que garantam a existência de empacotamentos ótimos. O principal destes foi obtido por H. Groemer ([17]) em 1963, onde tratou não apenas de empacotamentos de esferas, mas de corpos convexo simétricos em relação ao seu baricentro.

A busca por limitantes inferiores obteve alguns resultados significativos, mas nenhum deles por métodos construtivos. Buscou-se encontrar arranjos

reticulados que realizem o limitante da desigualdade de Minkovski, mas conseguiu-se apenas famílias que, assintoticamente (como função da dimensão  $n$ ) se aproximam desta densidade.

Quanto a busca de limitantes superiores, esta tem sido bastante intensa. Diversos limitantes foram determinados, cada um menor que o outro. Um dos mais recentes, demonstrado por R. Kellerhals em 1988 ([23]), refere-se a densidade local que, conforme vimos, coincide com o conceito usual de densidade no caso de empacotamentos reticulados (este também é o conceito que se estende de modo natural para arranjos em espaços hiperbólicos). Neste trabalho, ela determinou um limitante superior universal para densidade local  $ld(n)$  em espaços de curvatura constante:

$$ld(n) = \frac{n+1}{n-1} \cdot \frac{n}{2^{n-1}} \cdot \prod_{k=2}^{n-1} \left( \frac{k-1}{k+1} \right)^{\frac{n-k}{2}} \frac{1}{v_n}$$

onde  $v_n$  é o volume de um simplexo ideal hiperbólico<sup>5</sup>.

Finalmente, para encerrar esta seção, devemos realçar que apesar dos avanços nas questões principais serem relativamente modestos, o estudo de empacotamento de esferas é uma área de pesquisa extremamente pujante e produtiva, como pode ser constatado pela quantidade de resultados apresentados por Conway e Sloane ([11]) em seu tratado sobre o assunto. Talvez o principal motivo de interesse na área, além, é claro, de questões envolvendo um certo senso estético dos matemáticos, é a relação íntima entre empacotamentos de esferas e códigos corretores de erros, uma teoria fundamental para a transmissão digital de dados. Mas isto é uma outra história...

---

<sup>5</sup>Considere o disco unitário  $\mathbb{D}^n$  dotado de uma métrica hiperbólica de curvatura constante igual a  $-1$ . Seu bordo é uma esfera unitária onde escolhemos  $n+1$  pontos distintos. Traçamos todas as geodésicas do espaço hiperbólico que tenham estes pontos como pontos limites e construímos seu fecho convexo, o menor conjunto convexo (por geodésicas) contendo estas geodésicas. Obtemos assim um simplexo ideal de dimensão  $n$  e calcula-se seu volume (novamente com a métrica hiperbólica)  $v_n$ . O resultado independe da escolha inicial dos pontos.

## References

- [1] Aleksandrov, A.D., Kolmogorov, A.N. e Lavrent'ev, M.A. - *Mathematics, Its Content, Methods and Meaning* **3**, The M.I.T. Press, 1965.
- [2] Beardon, A.F. - *The Geometry of Discrete Groups*, Springer-Verlag, 1982.
- [3] Bieberbach, L. - *Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Raume I*, Mathematische Annalen **70** (1911), pp. 297-336.
- [4] Bieberbach, L. - *Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Raume II*, Mathematische Annalen **72** (1912), pp. 400-412.
- [5] Bravais, A. - *Mémoire sur les systèmes des point distribuées régulièrement sur un plan ou dans l'espace*, Journal Ecole Polytechnique **19**, 1-128.
- [6] Brown, H., Neubüser, J. e Zassenhaus, H. - *On integral groups. I. The reducible case*, Numer. Math. **19** (1972), 386-399.
- [7] Brown, H., Neubüser, J. e Zassenhaus, H. - *On integral groups. III. Normalizers*, Math. Comp. **27** (1973), 167-182.
- [8] Brown, H., Neubüser, J. e Zassenhaus, H. - *On integral groups. II. The irreducible case*, Numer. Math. **20** (1972/73), 22-31.
- [9] Burckhardt, J.J. - *Die Symmetrie der Kristalle*, Birkhäuser Verlag, Basel-Boston, MA, 196 pp., 1988.
- [10] Cosgrove - *The Groups of Wrath*, Math. Intel. **9** (3), 1987, 29-32.
- [11] Conway, J.H. e Sloane, N.J.A. - *Sphere Packings, Lattices and Groups*, Springer-Verlag, 1988.
- [12] Coxeter, H.S.M. e Moser, W.O.J. - *Generators and Relators for Discrete Groups*, Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [13] Farkas, D.R. - *Crystallographic Groups*, Rocky Mountain J. of Math. **11** (4), 1981, 511-551.
- [14] Fedorov, E.S. - *Symmetry of Crystals*, Amer. Crystallographic Assoc., New York, 1971; tradução do original russo *Symmetry of regular systems of figures*, Collected Works, Akad. Nauk SSSR, Moscow, 1949.
- [15] Fejes Tóth, L. - *Regular Figures*, Pergamon Press, 1964.

- [16] Fejes Tóth, G. e Kuperberg, W. - *Packing and Covering with Convex Sets*, in Handbook of Convex Geometry (P.M. Gruber e J.M. Wills, ed.) **2**, Elseviere Sc. Publ., 1993, 799-860.
- [17] Groemer, H. - *Existenzsätze für Lagerungen im Euklidischen Raum*, Math. Zeitschr. **81** (1963), 260-278.
- [18] Hessel, J.F.C. - *Krystallometrie oder Krystallometrie und Kristallographie, auf eigenthümliche Weise und mit Zugrundelegung neuer allgemeiner Lehren der reine Gestaltenkunde, sowie mit vollständiger Berücksichtigung der wichtigsten Arbeiten und Methoden anderer Krystallographen bearbeitet*, in H.W. Brandes e.a. (Hrsg.), Johann Samuel Taugott Gehlers Physikalisches Wörterbuch **9**, Leiptzig, 1831.
- [19] Hilbert, D. - *Mathematical Problems*, in Mathematics Developments Arising from Hilbert Problems, Proc. of Symp. in Pure Math. **28**, 1976, 1-34. Traduzido do original, publicado em Gott. Nach., 1900, 253-297.
- [20] Hilbert, D. e Cohn-Vossen, S. - *Geometry and the Imagination*, Chelsea Publishing House, New York, 1952.
- [21] Humphreys, J.E. - *Reflection Groups and Coxeter Groups*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics **29**, Cambridge University Press, 1990.
- [22] Jordan, C. - *Mémoire sur les groupes de mouvements*, Annali di Matematica, **2**, 167-215, 322-345; *Oeuvres* **4**, Paris, 1964, 231-302.
- [23] Kellerhall, R. - *Ball packings in spaces of constant curvature and the simplicial density function*, J. reine angew. Math. **494**, 1998, 189-203.
- [24] Korkine, A. e Zolotareff, G. - *Sur le formes quadratiques positives*, Math. Ann. **11**, 1877, 242-292.
- [25] Mehrtens, H. - *Ludwig Bieberbach and "Deutsche Mathematik"*, in Studies in the History of Mathematics (Esther R. Phillips, ed.), 195-241, Studies in Mathematics **26**, AMS, 1987.
- [26] Milnor, J. - *Hilbert's problem 18: On Crystallographic Groups, Fundamental Domains, and on Sphere Packings*, in Mathematics Developments Arising from Hilbert Problems, Proc. of Symp. in Pure Math. **28**, 1976, 491-506.
- [27] Minkovski, H. - *Extrait d'une lettre adressée à M. Hermite*, Bull. Sci. Math. **17** (2), 24-29 [Ges.Abh., volume 1 (Teubner, Leipzig, 1911) 266-270].

- [28] J. Osterlé, *Densité Maximale des Empilements de Sphères en Dimension 3*, Séminaire Bourbaki, Astérisque **266** (2000), 405-413.
- [29] Rogers, C. A. - *The Packing of Equal Spheres*, PLMS **8**, 1958, 609-620.
- [30] San Martin, L.A.B. - *Álgebras de Lie*, Editora da Unicamp, 1999.
- [31] Thue, A. - *Über die dichteste Zusammenstellung von kongruent Keisen in der ebene*, Norske Vid. Sels. Skr. **1**, 1-9.
- [32] M.A. Tsfasman e S.G. Vladut - *Algebraic-Geometric Codes - Mathematics and its Applications*; Soviet Series **58**, Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [33] Weyl, H. - *Symmetry*, Princeton University Press, 1952.
- [34] Wolf, J. A. - *Spaces of Constant Curvature*, Publish or Perish, Inc., Boston, 1974.
- [35] Wyckoff, R. W. G. - *The Analytical Expression of the Results of the Theory of Space Groups*, Washington, 1930.