

**CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DE
EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA**

**GENERACION DE ESTRUCTURAS NO PERIODICAS
ESTABLES POR METODOS DE PROYECCION**

**TESIS
DOCTOR EN CIENCIAS**

JOSE LUIS ARAGON VERA

Ensenada Baja California

Marzo de 1990

CENTRO DE INVESTIGACION CIENTIFICA
Y DE EDUCACION SUPERIOR DE ENSENADA
BAJA CALIFORNIA.

DIVISION DE FISICA APLICADA
DEPARTAMENTO DE OPTICA

GENERACION DE ESTRUCTURAS NO PERIODICAS ESTABLES
POR METODOS DE PROYECCION.

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos
necesarios para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

presenta:

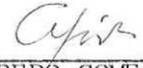
JOSE LUIS ARAGON VERA

Ensenada, Baja California, Febrero de 1990.

TESIS PRESENTADA POR: M.C. JOSE LUIS ARAGON VERA

Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITE:


DR. LUIS DAVID FERNANDO ROMEU CASAJUANA.- Director del Comité


DR. ALFREDO GOMEZ RODRIGUEZ.- Miembro del Comité


DR. RAMIRO PEREZ CAMPOS.- Miembro del Comité


DR. ENRIQUE GOMEZ TREVINO.- Miembro del Comité


DR. DAVID RIOS JARA.- Miembro del Comité


M.C. JOSUE ALVAREZ BORREGO, Jefe Interino del Departamento de Optica


DR. MARTIN LUIS CELAYA BARRAGAN, Director de la División de Física Aplicada


DR. HECTOR ECHAVARRIA HERAS, Director Académico Interino

MARZO 23, 1990

RESUMEN de la tesis de José Luis Aragón Vera presentada como requisito parcial para la obtención del grado de DOCTOR EN CIENCIAS en FÍSICA DE MATERIALES. Ensenada, Baja California, México, Febrero de 1990.

GENERACION DE ESTRUCTURAS NO PERIODICAS ESTABLES
POR METODOS DE PROYECCION.

Resumen aprobado por:


Dr. David Romeu Casajuana.
Director de Tesis.

En este trabajo, después de revisar los modelos propuestos para explicar el comportamiento real de los cuasicristales, y la herramienta matemática utilizada en esta área de la física de materiales, se procede a establecer el formalismo teórico que servirá para generar, por métodos de proyección, las estructuras propuestas por el modelo Decaedral-Recursivo, de especial interés por su contenido físico. Las estructuras resultantes de la proyección, al ser semejantes a las obtenidas con el citado modelo, son estables bajo un potencial interatómico.

El formalismo que proponemos se basa en una generalización de los métodos de proyección, y consiste en proyectar los puntos de una estructura periódica que caigan dentro de una banda "escalonada" de una manera adecuada. Así mismo, se propone un criterio para indizar, sin ambigüedad, los patrones de difracción de las estructuras obtenidas de esta manera, y que es válido para cualquier estructura de la que se posea información de espacio real. También se propone una aproximación para el cálculo analítico del patrón de difracción de estructuras proyectadas, muy apropiada para un cálculo por computadora.

DEDICATORIA

A mi abuelo ISMAEL, por supuesto.

A MIS PADRES

A MIS HERMANOS

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. David Romeu Casajuana, por la impecable dirección de este trabajo.

De manera muy especial, al Dr. Alfredo Gomez Rodriguez por el enorme e imprescindible apoyo que me dispensó.

Y, por la valiosa ayuda recibida en diversos aspectos de este trabajo, a las siguientes personas:

Dr. Miguel José Yacamán.

Mat. Favio Dávila Ojeda.

Dr. Raúl Herrera Becerra.

Dr. Victor Castaño Meneses.

Ing. Luis M. Beltrán del Rio C.

Ing. Samuel Tehuacanero.

Dr. Ricardo Fernández Tomé.

Dr. David Rios Jara.

Dr. Ramiro Pérez Campos.

CONTENIDO

	<u>Pagina</u>	
I	INTRODUCCION	1
II	MODELOS DE CUASICRISTALES	5
	II.1 Cuasicristal perfecto	6
	II.2 Cuasicristal aleatorio	9
	II.3 Vidrio icosaedro	12
	II.4 Cuasicristal DR	14
III	CRISTALOGRAFIA DE CUASICRISTALES	18
	III.1 Métodos de proyección	18
	III.1.1 Método de corte y proyección	20
	III.1.2 Método de corte	21
	III.2 Grupos espaciales en N dimensiones	24
	III.3 Patrón de difracción de estructuras proyectadas	25
	III.4 Variables hidrodinámicas de cuasicristales	27
	III.5 El método de corte y los modelos de cuasicristales	30
IV	ESTRELLAS Y DIFRACCION DE CUASICRISTALES DR	33
	IV.1 Estrellas eutácticas	33
	IV.2 Criterio de indización de los patrones de difracción	37

CONTENIDO (continuación)

	<u>Página</u>
V EL MODELO DR EN 6 DIMENSIONES	44
V.1 La estrella de 44 vértices	44
V.2 Difracción del cuasicristal básico icosaedral	45
V.3 Decoración de la hiper-red: El cristal en 6D	47
V.4 El hiperplano de corte	49
V.4.1 El patrón de difracción	57
V.4.2 Fonones y Fasones	62
V.4.3 Coherencia en las fronteras de corte	65
V.5 Un caso particular: El cuasicristal perfecto decorado	69
VI CONCLUSIONES	71
LITERATURA CITADA	74
ANEXO	82

LISTA DE FIGURAS

<u>Figura</u>	<u>Pagina</u>
1. Adoquinado de Penrose en 2D construido con dos rombos. (a). Perfecto. (b). Aleatorio. (De Henley, 1988)	7
2. Adoquinado de Penrose en 3D. (a). Romboedros. (b) Una posibilidad para la capa más interna. (De Audier, 1988)	7
3. Vértices permitidos para el adoquinado de Penrose en 2D.	11
4. Ejemplo en 2D del método de corte y proyección.	21
5. Cuasiredes en 1D obtenidas cortando con la línea E'' un cristal en 2D. (a). Decoración perpendicular a E'' . (b). Decoración con componentes sobre E^I y E''	22
6. Regiones de aceptación para generar cuasicristales por corte y proyección: (a). Icosaedro rómbico. (b). Triacontaedro rómbico.	30
7. Ejemplo en 2D de la línea de corte para obtener: (a). Un cuasicristal aleatorio. (b). Un vidrio icosaedral.	31
8. Paso del espacio real al recíproco via la red en 6D.	40
9. Estrellas para la fase T: (a). Para el modelo DR. (b). Para indizar el patrón de difracción.	41
10. Estrella icosaedral.	42
11. Patrón de difracción cinemático de 517 átomos de un CBI (a), y de 525 átomos de un cuasicristal perfecto (b).	46
12. Proyección sobre E^I de 517 puntos de una CBI en un plano normal al eje de simetría 5. Se indica la región de aceptación de un cuasicristal perfecto.	52

LISTA DE FIGURAS (continuación)

<u>Figura</u>		<u>Pagina</u>
13.	(A, B y C) son la secuencia del método recursivo en 2D para una estrella triangular. (A', B' y C') son el equivalente a cada paso en el esquema de corte y proyección.	56
14.	Ejemplo en 2D de la banda (a) o de la línea de corte (b) en la técnica de proyección que proponemos.	57
15.	Ejemplo en 2D del cálculo de la transformada de Fourier de una cuasired en 1D obtenida por corte y proyección.	59
16.	Banda aleatoria en 2D que sigue una estadística Browniana con el "paso" igual al parámetro de red. (De DiVicenzo, 1986)	61
17.	Mapa fasónico de 517 puntos de una CBI en un plano normal al eje de simetría 5.	64
18.	Proceso de Volterra para la construcción de una dislocación de borde en una red cuadrada. (De Bohsung y Trevin, 1988)	66
19.	Algunas franjas de una estructura de Penrose en 2D. (De Bohsung y Trevin, 1988)	67
20.	Proceso de Volterra aplicado a una red en 2D utilizada para generar una cuasired en 1D por corte y proyección.	68
21.	Ejemplo en 2D de un proceso recursivo en donde los puntos 0 pertenecen a una cuasired perfecta.	69
22.	(a). 200 átomos de un cuasicristal perfecto decorado. (b). Patrón de difracción cinemático.	70

LISTA DE TABLAS

<u>Tabla</u>	<u>Pagina</u>
I. Superficies atómicas (hiperesferas) que forman el motivo que genera el cristal en 6D. Los corchetes indican que se trata de una familia de posiciones.	49

GENERACION DE ESTRUCTURAS NO PERIODICAS ESTABLES
POR METODOS DE PROYECCION.

I INTRODUCCION

A partir del descubrimiento de los cuasicristales en 1984, todos los esfuerzos se han centrado en la determinación de la estructura de estos materiales. El reto ha sido, por supuesto, hallar modelos para esas estructuras atómicas e investigar sus propiedades. El debate sobre cuál de esos modelos es el más acertado, ha ocasionado una avalancha de artículos en la literatura especializada, que puede cuantificarse si mencionamos, como ejemplo, que una crónica del período inicial (de 1984 a 1986) contiene cerca de 700 referencias (Mackay, 1987).

Cada uno de los modelos que son convencionalmente aceptados, describen solo una parte de la realidad, esto es, las propiedades que un modelo no puede explicar son perfectamente aclaradas por otro modelo, mientras que éste último, a su vez, adolece de otra clase de deficiencias. Recientemente, se propuso un nuevo modelo, al que se llamó "Decaedral-Recursivo" (DR) (Romeu, 1988a, 1988b, 1989), que propone un mecanismo físico de crecimiento que es igualmente válido para cuasicristales como para otros estados ordenados de la materia, razón por la que, más que un modelo, es una teoría de nucleación y crecimiento. Tiene, además, la virtud de contener los aciertos de los modelos convencionales, con lo que se convierte en el más adecuado para explicar el comportamiento real de los cuasicristales.

Los modelos convencionales tienen la ventaja teórica de que pueden

asociarse (vía los métodos de proyección) con redes periódicas de dimensión mayor que 3, lo que les concede un lenguaje común e importantes beneficios, entre los que podemos mencionar:

1. Al asociarse con una red periódica, un cuasicristal puede ser tratado con las herramientas de la cristalografía clásica.

2. Los cálculos en espacio recíproco pueden hacerse de manera analítica, sin que afecte el tamaño finito de una estructura.

3. Como consecuencia del punto anterior, el desorden que es propio de cada modelo puede ser caracterizado de manera precisa en función de los vectores de la red recíproca.

4. Los defectos, dislocaciones y las propiedades elásticas de los cuasicristales pueden entenderse mejor dentro de este contexto

Todas estas ventajas no han sido aprovechadas, hasta ahora, por el modelo DR, que carece de una formulación de esta naturaleza. Es por eso, que el objetivo de este trabajo es establecer el nexo entre las estructuras generadas con el modelo DR (que denominaremos, en general, estructuras DR) y las redes periódicas de dimensión superior. Dicho de otra manera, la meta es obtener estructuras DR por métodos de proyección. La relevancia de esta tarea, se encuentra en que no solamente proveerá al modelo DR de una herramienta útil y necesaria, también es importante por el hecho de que formulará el mencionado modelo en un lenguaje común a esta área de la investigación en materiales. Por otro lado, como consecuencia de que las estructuras DR son, por construcción, estables bajo un potencial interatómico, sería la primera vez que se consigue, usando métodos de proyección, generar posiciones atómicas con ésta

propiedad.

El trabajo está organizado como sigue. En el capítulo que sigue a esta introducción, se presenta una revisión crítica de los modelos más importantes de estructuras cuasicristalinas, incluyendo, naturalmente, el modelo DR. En el Capítulo III se establece nuestra herramienta de trabajo, esto es, se presenta el formalismo matemático asociado con la teoría de los cuasicristales. Estos dos capítulos constituyen, en esencia, una revisión general de parte de la literatura que nos interesa, exceptuando la Sección III.3, en donde nosotros proponemos una aproximación al cálculo analítico de los patrones de difracción de estructuras proyectadas, muy apropiada para la elaboración de un algoritmo numérico que sea válido para cualquier dimensión desde donde se proyecte. En el Capítulo IV se discute la cuestión de la proyectabilidad de las estrellas asociadas con el modelo DR, y se propone una técnica para indizar, sin ambigüedad, los patrones de difracción de estas estructuras, cuya generalidad se extiende a todo tipo de estructuras de las que se tenga información de espacio real. Estos resultados serán esenciales para el Capítulo V, en donde se plantea el formalismo de proyección con el que se pueden generar las estructuras DR. Finalmente, la demostración a un importante teorema que proponemos en el Capítulo IV se presenta en el Anexo A.

Para finalizar, es importante mencionar que en este trabajo, en ocasiones nos tomamos la libertad de especular sobre posibles vías que pueden ser exploradas para interpretar, con la técnica que proponemos, muchas de las propiedades de las estructuras DR. Esto es, presentamos la idea sin llevarla hasta sus últimas consecuencias. Creemos que esto es

válido, en la medida que, como resultado final, ofrecemos un procedimiento nuevo de proyección cuya totalidad de consecuencias no es posible agotarlas en un solo trabajo.

II MODELOS DE CUASICRISTALES

Es muy difícil empezar a escribir algo acerca de los cuasicristales sin referirse al descubrimiento de D. Shechtman y colaboradores (Shechtman, *et al.*, 1984) y de lo trascendente que resultó ser dentro del campo de la cristalografía: una aleación $Al_{63}Mn_{37}$ obtenida por enfriamiento rápido tenía un patrón de difracción de electrones con puntos bien definidos que mostraba ejes de simetría 5, en clara contradicción con la cristalografía clásica. Los puntos de difracción sugieren un orden traslacional de largo alcance como en un cristal periódico, pero los ejes de simetría 5 son incompatibles con la periodicidad.

Este descubrimiento demandó una respuesta a las siguientes cuestiones:

1. ¿ Como construir una estructura no periódica que tenga orden (orientacional y traslacional) de largo alcance ?
2. ¿ Mediante que mecanismo físico se generan tales estructuras ?

Con este propósito se han propuesto modelos que han significado un considerable progreso para el entendimiento de la fase cuasicristalina. Estos modelos se pueden agrupar, siguiendo consideraciones geométricas, en tres clases (Henley, 1987):

Clase I: Cuasicristal perfecto.

Clase II: Cuasicristal aleatorio.

Clase III: Vidrio icosaedral.

Nosotros incluimos un modelo nuevo que será el más importante para los propósitos de este trabajo y que, como veremos, más que un modelo estructural, se trata de una teoría de nucleación y crecimiento. Sin

embargo, para fines de comparación, lo incluiremos en la primera categoría:

Clase IV: Cuasicristal DR.

En las siguientes secciones ofrecemos una revisión crítica de estos modelos con objeto no solo de situar este trabajo en un contexto adecuado, sino también de hacer claras las razones que tenemos para creer que este último modelo es el que realmente reproduce la realidad física.

A lo largo de este trabajo, trataremos de utilizar el término cuasicristal solamente cuando se esté incluyendo una decoración atómica, y reservaremos la palabra "cuasired" cuando se trate de una distribución no periódica de puntos matemáticos. Muchas veces, sin embargo, forzados por el mal uso que se ha dado a estos términos, no podremos hacer tal distinción.

II.1 Cuasicristal perfecto

Este fué el primer modelo propuesto para explicar los hechos experimentales y se basa en una generalización a 3 dimensiones (3D) del famoso adoquinado no periódico del plano, descubierto por el matemático inglés R. Penrose (Penrose, 1974). El adoquinado de Penrose se construye por medio de un adecuado ensamble de dos rombos (Fig.1a) y es un ejemplo bidimensional de una estructura no periódica cuyo patrón de difracción consiste también de puntos definidos que exhiben simetría pentagonal (Mackay 1982). Dada esta situación, era muy natural pensar que una generalización a 3D de esta estructura pudiera ser la solución buscada. Incidentalmente, el adoquinado de Penrose en 3D fué construido por A.

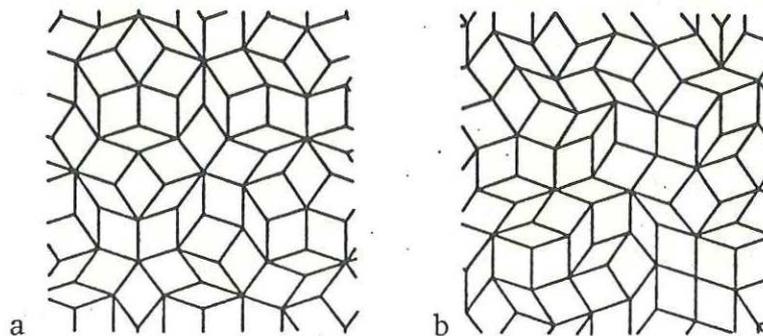


Figura 1. Adoquinados de Penrose en 2D construidos con dos rombos. (a) perfecto. (b). Aleatorio. (De Henley, 1988)

Mackay (Mackay, 1981), tres años antes de la publicación del descubrimiento de Shechtman, y se basa en un apilamiento de dos diferentes romboedros (Fig.2).

Analogamente al caso bidimensional, estos dos romboedros pueden dar lugar a un adoquinado periódico del espacio si no existen estipulaciones sobre la manera como se deben apilar. Con la intención de garantizar que la estructura resultante sea no periódica, un conjunto de **reglas de unión**, que restringen la forma en que los romboedros pueden unirse, son impuestas (Gardner, 1977, Levine y Steinhardt, 1986 , Katz, 1988).

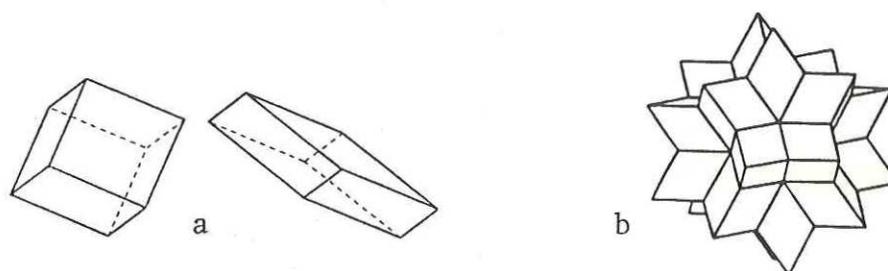


Figura 2. Adoquinado de Penrose en 3D. (a) Romboedros. (b) una posibilidad para la capa más interna. (De Audier, 1988)

Levine y Steinhardt (1984) calcularon el patrón de difracción de un adoquinado tridimensional de Penrose y hallaron que la posición de los puntos de difracción era la misma que las observadas por Shechtman, sin

embargo había una clara diferencia en las intensidades. Esta discrepancia fué explicada arguyendo que, en cristalografía clásica, uno necesita una red y una decoración; en los cálculos solo se había tomado en cuenta el equivalente cuasiperiódico de la red. Faltaba encontrar una adecuada decoración de ésta. En otras palabras, el problema es: una vez que se construye en tres dimensiones una estructura ideal no periódica, ¿ en dónde van los átomos ?. Esta cuestión fundamental constituye el talón de Aquiles del modelo del cuasicristal perfecto y hasta el momento no se ha dado una respuesta satisfactoria.

Gran cantidad de esfuerzo se ha orientado a este problema produciendo modelos alternativos que aproximan las intensidades del patrón de difracción de algunos materiales (Audier y Guyot, 1986, Elser y Henley, 1985, Shen *et al.*, 1987, Cahn y Gratias, 1986, Audier y Guyot, 1988), pero es un hecho que existen muchos obstáculos teóricos que dificultan la labor de determinar la decoración atómica real. Podemos mencionar algunos de estos:

1. Existe una infinidad de maneras, todas ellas diferentes, de empaquetar las celdas unitarias (romboedros) y cada una de ellas produce cuasicristales de diferentes clases, llamadas de **isomorfismo local (IL)**. La estructura atómica no puede determinarse experimentalmente, a menos que se identifique correctamente la decoración de la celda unitaria y la clase de isomorfismo local, pues variaciones en la decoración y en la clase IL pueden modular las fases y las intensidades del patrón de difracción (Levine y Steinhardt, 1986).

2. Incluso en el caso en que se tenga una clase IL fija, en los patrones de difracción de cuasicristales decorados no puede, en general,

separarse el factor de red y el factor de estructura (Jâric, 1986).

3. Pueden construirse, por métodos diferentes al de las reglas de unión, estructuras más generales en que cada celda unitaria se decora de manera diferente dependiendo de su posición dentro de la estructura (Bak, 1986).

Finalmente, en lo que se refiere al mecanismo físico por el que se generan estas estructuras, el modelo del cuasicristal encara el problema de que la naturaleza de las reglas de unión es muy complicada, de manera que la cuestión de su implementación por interacciones reales entre átomos no ha podido ser resuelta.

La ventaja que este modelo tiene es que, una vez encontrada la decoración, se conocen muy bien las propiedades geométricas de la cuasired en 3D, lo que permite un control estricto de las distancias interatómicas y la posibilidad de pruebas directas del modelo através de medidas de composición y densidad. Por otro lado, se construye de un apilamiento celdas unitarias (dos, como mínimo), lo que conviene a la perspectiva de la cristalografía clásica

II.2 Cuasicristal aleatorio

Partiendo de la evidencia experimental de que los procesos reales de enfriamiento rápido incorporan gran cantidad de desorden estructural (Heiney *et al.*, 1987), el modelo del cuasicristal aleatorio (Elser, 1987) sugiere que este desorden se incorpora durante el crecimiento por medio de violaciones a las reglas de unión. Otras observaciones apoyan esta

suposición: i). Es posible crecer dominios finitos de un adoquinado de Penrose ideal, siguiendo estrictamente las reglas de unión, que no pueden ser extendidos hasta el infinito sin cometer una infracción a estas. ii). La simetría y las intensidades del patrón de difracción no se alteran por la inclusión de una clase muy general de desorden (Elser, 1985) y iii). No es posible una interpretación de las reglas de unión en términos físicos.

Es claro entonces que este modelo abandona la búsqueda de la decoración del cuasicristal perfecto para, en su lugar, considerar modelos aleatorios en los que el orden de largo alcance existe en el sentido de promedio estadístico.

Un ejemplo de un cuasicristal aleatorio es el adoquinado aleatorio de Penrose en 2D (Fig.1b). Este consiste en arreglos de los mismos dos rombos pero sin reglas de unión, excepto que los bordes se unen con bordes y que no hay huecos ni superposiciones.

La pregunta que de entrada se puede formular es ¿Cómo se logra el orden de largo alcance que se observa en la fase cuasicristalina?. Para responderla es necesario mencionar que en un adoquinado ideal de Penrose en 2D existen solo 8 posibles configuraciones de vértices (o tipos de enlaces entre puntos vecinos) (Fig.3) y, de manera análoga, en 3D solo se permiten 24 tipos de enlaces (Katz y Duneau, 1986, Katz, 1988). Aunque en un cuasicristal aleatorio no se respetan las reglas de unión, se exige que los tipos de enlaces que se puedan formar sean los 24 permitidos en el Penrose ideal más todos aquellos que también estén orientados en direcciones congruentes con la simetría orientacional de la estructura (Henley, 1987). Esto constituye una especie de reglas de unión débiles

que dan como resultado una red cuyos enlaces están orientados en direcciones de simetría icosaedral. A este tipo de redes se les denomina "redes bien conectadas".

En cuanto al orden traslacional (que se considera sinónimo de la existencia de puntos de difracción bien definidos) se explica en términos de espacios de dimensión 6, por lo que aplazamos la discusión de este punto hasta el siguiente capítulo.

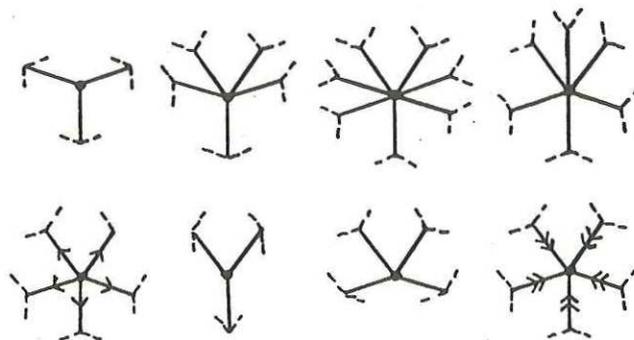


Figura 3. Vértices permitidos para el adoquinado de Penrose en 2D.

Para redes bien conectadas es posible un cálculo analítico de la entropía del cuasicristal (Henley, 1988) y de esta manera explicar el mecanismo de crecimiento de la fase cuasicristalina que se ve favorecida por razones de entropía (Elser, 1987).

Una evidencia que está a favor de este modelo, es que puede ser generado modificando una técnica propuesta por Widom, *et al.* (1987), que consiste en simular el proceso de enfriamiento rápido de un líquido que consiste de átomos de dos tamaños sujetos a un potencial de Lenard-Jones y que condensan a una estructura ordenada en 2D. Las modificaciones propuestas a este modelo, van encaminadas a reducir el desorden que, de otra manera, tendría la estructura resultante. El resultado final es un cuasicristal aleatorio bidimensional (Elser, 1987).

Es evidente que en comparación con el cuasicristal perfecto el cuasicristal aleatorio se presenta como una mejor aproximación a los reales, pues incluye el desorden que se observa, sin embargo aún queda sin responder la cuestión fundamental: ¿ en dónde van los átomos ?. Por otra parte, este modelo sugiere que el cuasicristal pudiera ser inestable a temperatura ambiente debido a la gran cantidad de entropía que resulta de las constantes violaciones a las reglas de unión (Elser, 1985). En este sentido, el cuasicristal es una estructura fuera de equilibrio, si bien, es un estado ordenado que muestra puntos de difracción. Sin embargo, aleaciones como $\text{Al}_6\text{Li}_2\text{Cu}$ parecen mostrar una fase icosaedral en equilibrio (Marcus y Elser, 1986); si éste es el caso, no es evidente que se pueda explicar con este modelo. Finalmente, las modificaciones propuestas a la simulación de Widom *et al.* (1987), en un intento de darle realidad física al modelo, en la medida que están basadas en las reglas débiles de unión, no dejan de ser poco realistas (además se incorpora el inconveniente de que es un mecanismo en 2 dimensiones).

II.3 Vidrio icosaedral

Al igual que el cuasicristal aleatorio, el vidrio icosaedral es una estructura aleatoria pero de una naturaleza diferente pues no sigue las reglas débiles de unión (formando una red mal conectada) y puede dejar huecos.

El modelo parte de la evidencia de que en la fase líquida la formación de semillas icosaedrales de crecimiento es altamente favorecida, desde el punto de vista energético, y propone que un

cuasicristal se forma de un agregado aleatorio de icosaedros siguiendo ciertas reglas. Estas reglas obligan a los icosaedros a unirse vértice a vértice, cara con cara o lado con lado con una orientación común. Esta construcción garantiza que el modelo tenga orden orientacional de largo alcance y no resulte una estructura amorfa. En cuanto al orden traslacional, Stephens y Goldman (1986) ofrecieron una prueba, basada en una simulación numérica, de que estas restricciones sobre la manera de pegar icosaedros son suficientes para obtener puntos de difracción.

Puesto que los icosaedros no pueden llenar el espacio sin dejar huecos, la estructura resultante tiene gran cantidad de estos, por lo que se asume que las regiones vacantes son ocupadas por un arreglo amorfo de átomos que se debe formar al mismo tiempo que los agregados icosaedrales sin alterar el orden orientacional.

Uno de los éxitos del vidrio icosaedral, es que el ancho de los picos de difracción que caracteriza sus estructuras coincide con los observados para muchas aleaciones. Este éxito, sin embargo, se vió posteriormente ensombrecido al encontrarse que el ancho de los picos de la aleación $\text{Al}_{60}\text{Li}_{30}\text{Cu}_{10}$ era menor, por un factor nada despreciable (Horn *et al.*, 1986), que el predicho por éste modelo.

Por otro lado, debido a que el vidrio icosaedral es una clase más general de cuasicristal aleatorio, presenta el inconveniente de que incorpora gran cantidad de desorden en la estructura. Imágenes de alta resolución de cuasicristales, que incluso están bajo esfuerzos, muestran menos desorden que el predicho por este modelo (Lubensky *et al.*, 1986). Finalmente, otra dificultad es que el modelo se basa en la premisa de que existen fuerzas adicionales de largo alcance que inducen a los icosaedros

a unirse con una orientación común, lo cual parece muy poco plausible.

II.4 Cuasicristal DR

Este modelo se desliga de las preocupaciones geométricas inherentes a la forma de unir romboedros o icosaedros y propone, más que un modelo geométrico, un mecanismo físico de crecimiento que es válido no solo para cuasicristales, sino para cualquier estructura ordenada de la materia. El mecanismo, llamado de **crecimiento decaedral**, se fundamenta en la extrapolación, a sólidos, de las observaciones hechas las simulaciones de enfriamiento de gases raros, en donde el crecimiento alrededor de pequeños conglomerados de átomos se lleva a cabo completando decaedros irregulares en la superficie (Terrones y Romeu). Las partículas más estables que sirven para iniciar el crecimiento decaedral son aquellas que tienen 13,19,23,26,... átomos, conocidos como números mágicos (Harris *et al.*, 1984).

De esta manera, el modelo toma un icosaedro de 13 átomos e inicia el crecimiento completando decaedros en la superficie (la posición exacta de los átomos se determina relajando la estructura bajo un potencial de Lennard Jones), hasta que se alcance un grado de frustración geométrica que requiera el uso de átomos más pequeños. Después de esto, el crecimiento puede continuar usando átomos grandes hasta que la frustración alcance nuevamente un valor crítico (Romeu, 1988b). Es posible también añadir los átomos pequeños antes de que la frustración alcance un máximo, produciendo estructuras con diferente composición.

El proceso de completar decaedros se puede ver, desde el punto de

vista geométrico, como una especie de dualización en en que los vértices de la nueva capa se colocan en las caras de la anterior. Esto garantiza el orden orientacional de la estructura. El problema al que se enfrentó este modelo de crecimiento era que, por tratarse de una simulación numérica, el tiempo de cómputo limita el tamaño de la partícula, entonces no había prueba de que el proceso se pudiera continuar hasta infinito. Por tanto, se propuso una extensión geométrica de este proceso que eliminaba esta restricción y que, además, generalizaba el modelo de crecimiento decaedral. A esta extensión geométrica se le llamó **modelo recursivo** (Romeu, 1989), y a la teoría completa le llamaremos **modelo decaedral-recursivo (DR)**.

El modelo recursivo se basa en el concepto de red de coincidencias (Ranganathan, 1966 , Beltrán del Rio y Gómez, 1989) y consiste en los siguientes pasos:

1. Se elige una "semilla" de crecimiento que en adelante llamaremos **estrella**.

2. Se traslada esta estrella a las posiciones de un conjunto definido de átomos (en el paso inicial, se traslada a un conjunto de sus propios átomos).

Como consecuencia de esto, cuando los nuevos orígenes se escogen adecuadamente, se obtienen un gran número de coincidencias entre los átomos originales y los trasladados, pero también algunos átomos van a quedar superpuestos, de manera que:

3. Se eliminan los átomos superpuestos y se regresa al paso anterior.

Al conjunto de átomos en los que la estrella se traslada (paso 2) se

les denomina **puntos 0** y van a jugar un papel fundamental en el desarrollo de este trabajo.

Es interesante notar que este proceso es una generalización del caso cristalino donde la estructura es generada por desplazamientos de la celda unitaria en puntos de la red. Para cuasicristales, la celda unitaria es reemplazada por una estrella con la simetría adecuada y los desplazamientos son restringidos a ciertos puntos de la cuasired; los puntos 0.

Este mecanismo de crecimiento ha sido capaz de producir cuasicristales que reproducen con gran aproximación las intensidades del patrón de difracción e incluso las imágenes de campo oscuro y claro observadas por microscopía electrónica de transmisión (Romeu, 1988). Puede explicar también el desorden y el crecimiento dendrítico que se observa en los cuasicristales (referencia anterior) y, finalmente, tiene la gran virtud de que incorpora propiedades de los demás modelos. Por ejemplo, es posible que los puntos 0 sean seleccionados de manera tal que formen una cuasired perfecta (o aleatoria), con lo que el resultado final será un cuasicristal perfecto (o aleatorio) con una decoración bien definida en donde se conocen sin ambigüedad las posiciones atómicas. También incorpora la hipótesis fundamental del vidrio icosaedral de que la formación de semillas icosaedrales de crecimiento es altamente favorecida desde el punto de vista energético.

En este contexto, podemos decir que el modelo DR es una unificación de los demás modelos.

Por tratarse fundamentalmente de un mecanismo de crecimiento, este modelo tiene el inconveniente de no contar con un formalismo matemático

semejante al que puede establecerse en los modelos anteriores. Este formalismo, que consiste en relacionar los cuasicristales DR con redes periódicas de dimensión mayor que 3, es de fundamental importancia si se quiere, entre otras cosas, aplicar en el modelo las poderosas herramientas de la cristalografía clásica y si se pretende utilizar un lenguaje común a esta rama de la investigación en materiales.

Tal formalización es el objetivo de este trabajo y antes de avocarnos a esa tarea, dedicaremos el siguiente capítulo a una revisión de las técnicas matemáticas de que hablamos, y su aplicación a los 3 primeros modelos descritos. No dudamos que se harán patentes las ventajas que se incorporarían al modelo DR en el momento que cuente con una herramienta matemática de esta naturaleza.

III CRISTALOGRAFIA DE CUASICRISTALES.

Es un hecho que ninguna red periódica en 3D puede tener simetría icosaedrales o cualquier otro grupo puntual de simetría que contenga ejes de rotación 5, 7 o de mayor orden. Es por esto que el descubrimiento de la aleación $Al_{13}Mn_6$ (Shechtman, *et al.*, 1984) causó gran sorpresa entre los cristalógrafos pues por primera vez se topaban con una estructura que mostraba puntos de difracción exhibiendo simetría icosaedrales y que no podía ser catalogada acorde a redes de Bravais ni podía asociarse con alguno de los bien estudiados 230 grupos espaciales de simetría.

Sin embargo, esas simetrías no cristalográficas son compatibles con redes de Bravais en espacios de dimensión mayor que 3, así por ejemplo, los cuasicristales icosaedrales pueden ser descritos en términos de cristales en 6 dimensiones. Esta conexión entre cuasicristal y cristal en hiperespacios ha abierto un camino a la aplicación de conceptos cristalográficos en cuasicristales y es la base de los métodos de proyección y de corte que han sido ampliamente usados para la construcción y descripción de estructuras cuasicristalinas.

La intención de este capítulo es presentar algunos aspectos de esta parte de la teoría de los cuasicristales. La revisión será básicamente descriptiva y solo nos detendremos en aquellos puntos que serán importantes más adelante.

III.1 Métodos de proyección.

La motivación que dió lugar al descubrimiento del adoquinado de

Penrose fué fundamentalmente matemática, pues el problema de adoquinar el plano (o el espacio) de una manera no periódica era un problema clásico de la geometría. Esto dió lugar a que el progreso en el campo de los cuasicristales se viera favorecido por la investigación de los matemáticos sobre estructuras no periódicas. Así, De Bruijn (1981) hizo un análisis algebraico exhaustivo del adoquinado de Penrose y mostró que podía ser obtenido como la proyección de un subconjunto de una red de 5D sobre un plano. El método fué extendido por P.Kramer y R.Neri (1984) para construir un análogo tridimensional del Penrose proyectando una red de 6D. Después del reporte de D. Shetchman, varios autores propusieron variaciones de este método con el fin de reproducir los patrones de difracción observados. Estos métodos pueden agruparse en dos clases: métodos de proyección directa y métodos duales.

Nuestra atención estará concentrada únicamente en los métodos de proyección directa por la importancia que tendrán en este trabajo. Solamente como referencia sobre los métodos duales, mencionaremos que el método original sugerido por Kramer y Neri (1984) pertenece a esta categoría (véase también: Kramer, 1985,1986,1987, Haase *et al.*, 1987, Pavlovitch y Kléman, 1987), así como algunas modificaciones a éste (Kramer, 1988, Kramer y Zeidler, 1989). También entre los métodos duales se cuenta el "método dual generalizado" (GDM) (Levine y Steinhardt, 1984, Socolar y Steinhardt, 1986), de gran versatilidad y que no necesita la existencia de hiperespacios, lo que, paradójicamente, limita sus aplicaciones. La cuestión de la equivalencia entre estos dos métodos es discutida por Gäler y Rhyner (1986).

III.1.1 Método de corte y proyección.

Esta técnica, también llamada método de la banda, fué propuesta independientemente por M.Duneau y A.Katz (1985), V.Elser (1986) y P.A.Kalugin *et al.* (1986), y consiste en obtener los vértices de una estructura cuasiperiódica proyectando puntos de una red periódica de dimensión mayor. Los puntos que se deben proyectar deben estar dentro de una cierta región que, en un caso particular, puede ser generada al desplazar el dominio fundamental de la red sobre el "espacio real" en donde se proyectarán los puntos.

Formalmente se puede enunciar así:

Consideremos $\mathcal{L}=\mathbb{Z}^N$ una red periódica de dimensión N generada por la base natural $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^N$. El cubo unitario Π_N de \mathbb{Z}^N es el conjunto:

$$\Pi_N = \sum_{j=1}^N x_j \mathbf{e}_j \quad 0 < x_j < 1$$

que es un caso particular de un dominio fundamental de la red. El siguiente paso consiste en descomponer \mathbb{R}^N en dos subespacios ortogonales, $\mathbb{R}^N = E'' \oplus E^\perp$ donde E'' es el "espacio real" de dimensión n , en donde se va a generar la estructura (se asume que E'' no contiene puntos de la red \mathcal{L} , excepto el origen).

La banda S se genera desplazando Π_N sobre E'' , y los puntos de la estructura no periódica se obtienen proyectando ortogonalmente (sobre E'') todos los puntos que caen dentro de la banda S . Una forma alternativa de definir la banda es introduciendo el concepto de **región de aceptación** Ω que es la proyección ortogonal de Π_N sobre E^\perp , con lo que la banda se define como: $S = \Omega \oplus E''$.

Las posibles estructuras que se pueden obtener difieren en la forma

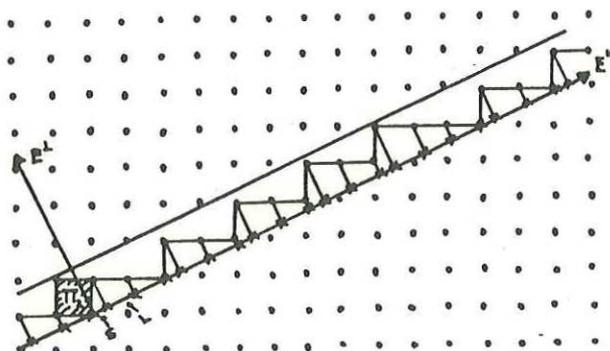


Figura 4. Ejemplo en 2D del método de corte y proyección.

de la banda S , que puede generarse desplazando cualquier región arbitraria de \mathbb{R}^N , y en traslaciones de esta banda a lo largo de E^\perp .

El ejemplo más sencillo es el cuasicristal en 1D obtenido proyectando una red cuadrada como se muestra en la Figura 4. Esto produce una estructura cuasiperiódica en E'' (de pendiente irracional) donde la distancia entre átomos sucesivos es una distancia corta S o larga L . Si la inclinación de E'' es $\tau=(1+\sqrt{5})/2$, "la razón áurea", la distribución de estas distancias sigue la bien conocida sucesión de Fibonacci.

III.1.2 Método de corte.

Este es un caso más general del método anterior que fué desarrollado, en principio, para el estudio y generación de estructuras incommensuradas (Janner y Janssen 1980). Se fundamenta en un resultado de la teoría de las funciones cuasiperiódicas, a saber, que una función cuasiperiódica en 3D $f(x_1, x_2, x_3)$ puede obtenerse restringiendo a 3 variables adecuadamente seleccionadas, una función periódica de N

variables $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$, con $N > 3$ (Janssen, 1988).

La importancia de este resultado se hace evidente en su implicación geométrica: una estructura cuasiperiódica en 3D puede obtenerse por un corte adecuado de una estructura periódica, o cristal, de mas de 3 dimensiones (Bak, 1986, Janssen, 1986, 1988).

Antes de considerar el cristal en 3 dimensiones conviene entender como un cuasicristal en 1D puede entenderse en términos de un cristal en 2D.

Al igual que en el caso cristalino, un cuasicristal puede ser descrito por medio de una función de densidad de masa que, en el caso en 1D, su forma más general es:

$$\rho(x) = \sum_{m,n} A_{m,n} \cos(mq_1x + nq_2x)$$

donde m y n son enteros y q_1/q_2 es un número irracional (Bak, 1986). Si hacemos $x_1 = q_1x$ y $x_2 = q_2x$, la densidad ρ puede ser escrita como una función de estas dos variables: $\rho(x) = \hat{\rho}(x_1, x_2)$.

La función $\hat{\rho}$ es periódica en sus dos variables x_1 y x_2 con período

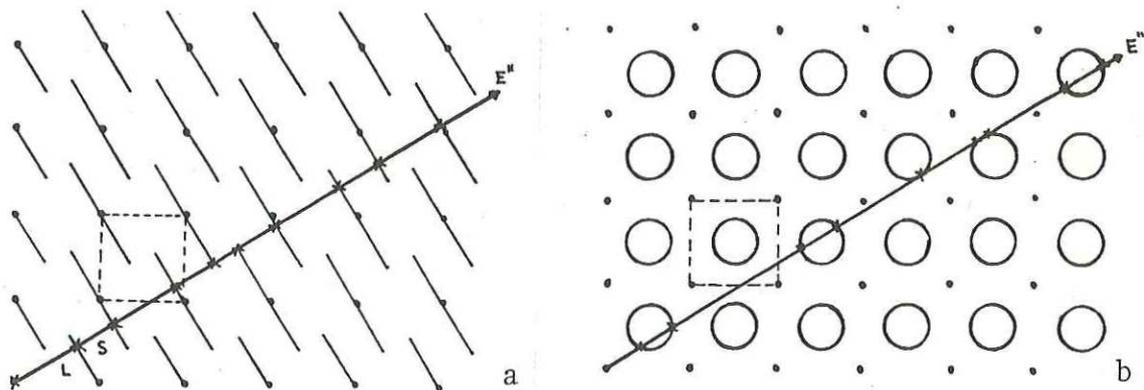


Figura 5. Cuasiredes en 1D obtenidos cortando, con la línea E'' un cristal en 2D. (a) decoración perpendicular a E'' . (b) decoración con componentes sobre E'' y E' .

2π , y define un cristal en 2 dimensiones. De manera que el cuasicristal en 1D es definido por la densidad a lo largo de una línea, E'' , con pendiente $p=q_1/q_2$, en un cristal en 2D.

Todas las posibles estructuras difieren solo en la traslación de la línea a lo largo de la dirección perpendicular a E'' y en la decoración de la red en 2D, esto es, en el motivo asociado con la celda unitaria. Una elección interesante constituye un conjunto de líneas rectas perpendiculares a la línea E'' , como se muestra en la Figura 5a. Esto produce la misma estructura de Fibonacci que se obtuvo por corte y proyección (Figura 4).

Aprovechamos este resultado para mencionar que, en general, siempre que la decoración sea perpendicular a E'' , el método de corte es equivalente al de corte y proyección (Oguey *et al.* 1988). La ventaja del método de corte es que puede obtener diferentes estructuras si se consideran decoraciones que también tengan componentes sobre E'' , como se muestra en la Figura 5b.

La generalización a más dimensiones es inmediata y la enunciaremos con el fin de completar esta discusión:

Supongamos que tenemos la red $\mathfrak{L}=\mathbb{Z}^N$ y la siguiente descomposición ortogonal $\mathbb{R}^N=E''\oplus E^\perp$, donde E'' es el espacio real. Sea \mathcal{A} un subconjunto acotado de \mathbb{R}^N , que llamaremos **superficie atómica** o **decoración** de \mathfrak{L} y sea \mathfrak{C}_N el cristal en N dimensiones definido por $\mathfrak{C}_N = \{ \mathcal{A} + \xi \mid \xi \in \mathfrak{L} \}$. Una estructura no periódica en E'' se obtiene de la intersección $E'' \cap \mathfrak{C}_N$.

En el caso en que E'' se traslade por un vector $t \in E^\perp$ se obtienen diferentes estructuras dadas por $(E''+t) \cap \mathfrak{C}_N$.

Si \mathcal{A} es un subconjunto acotado de E^\perp , la estructura $E'' \cap \mathfrak{C}_N$ también

puede obtenerse por corte y proyección, y en este caso se tiene $A=\Omega$, la región de aceptación.

III.2 Grupos espaciales en N dimensiones.

Los métodos de proyección proveen el soporte necesario para poder aplicar los conceptos de grupos espaciales y redes de Bravais a cuasicristales, pues ahora el grupo espacial de un cuasicristal se puede definir en N dimensiones y se le puede asociar una red de Bravais.

Una vez que tenemos una estructura no periódica en, por ejemplo, 3 dimensiones a la que se le asocia un grupo puntual de simetría H (H es el grupo puntual del patrón de difracción de la estructura), se buscará un grupo G en N dimensiones que pueda verse como el grupo puntual de una red de Bravais de N dimensiones y que sea isomorfo al grupo H de 3 dimensiones. El grupo G mapea la red de Bravais en N dimensiones en si misma, pero también debe mapear en si mismas las estructuras en E'' y en E^\perp . Es por esta última restricción que muy pocos de los muchos grupos espaciales en dimensiones superiores son relevantes para estructuras cuasicristalinas.

Como ejemplo, en el caso específico de una estructura icosaedral, hay exactamente dos grupos puntuales icosaedrales, a saber, el grupo Y, con 60 elementos, de todas las rotaciones propias que dejan invariante un icosaedro, y el grupo $Y_I = Y \times I$ (I=inversión), con 120 elementos, de todas las transformaciones de simetría del icosaedro. Este último es el asociado con el patrón de difracción de la fase icosaedral de, por ejemplo, las aleaciones Al-Tm (Bendersky y Kaufman, 1986) y Al-Cu-Li

(Cassada *et al.*, 1989). Para estos grupos, hay solamente 3 redes de Bravais en 6 dimensiones (cúbica simple, fcc y bcc) que combinadas dan lugar a 16 grupos espaciales (Janssen, 1986, Levitov y Rhyner, 1988).

Si tenemos identificado el grupo H de una estructura cuasicristalina dada, Kramer (1986) propone un método general que se basa en técnicas de inducción y subducción de representaciones de grupos (Haase y Butler, 1984), para hallar una representación G de H de dimension N (previamente se determina el valor de N) que pueda ser interpretada como el grupo puntual de alguna red de Bravais en N dimensiones. Dado esto, la clasificación de los grupos se puede reducir al problema de enumerar todas las redes invariantes bajo G (Cartier, 1987).

Esta técnica se puede aplicar siempre que se trate de redes cúbicas en N dimensiones, pues solo para estas redes se tiene bien estudiado su grupo espacial: el grupo hiperoctaedral $\Omega(N)$ (Kramer, 1988b). Para otros tipos de redes (tetragonales, por ejemplo) no se ha propuesto un procedimiento general semejante.

III.3 Patrón de difracción de estructuras proyectadas.

Una gran ventaja de los métodos de proyección directa, que no tienen los métodos duales, es que el cálculo del patrón de difracción de la estructura obtenida proyectando (o cortando) se puede hacer de manera analítica.

En caso del método de la banda, la manera de proceder es como sigue (Katz y Duneau, 1986). Sea $\mu(\mathbf{x})$ la densidad de masa asociada a la red \mathcal{L} :

$$\mu(\mathbf{x}) = \sum_{\xi \in \mathcal{L}} \delta(\mathbf{x} - \xi)$$

y sea $C_S(\mathbf{x}^\perp)$ la función característica de la banda definida como:

$$C_S(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in S \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Si $\mu^*(\mathbf{k})$ y $C_S^*(\mathbf{k})$ son sus respectivas transformadas de Fourier, entonces la transformada de Fourier de la estructura proyectada está dada por la siguiente convolución:

$$\rho^*(\mathbf{k}^\parallel) = \mu^*(\mathbf{k}^\parallel) \circ [\delta(\mathbf{k}^\parallel) C_\Omega^*(\mathbf{k}^\perp)] \quad (1)$$

donde se utilizó la descomposición $\mathbf{x} = (\mathbf{x}^\parallel, \mathbf{x}^\perp)$ y $\mathbf{k} = (\mathbf{k}^\parallel, \mathbf{k}^\perp)$, $\mathbf{x}^\parallel, \mathbf{k}^\parallel \in E^\parallel$ y $\mathbf{x}^\perp, \mathbf{k}^\perp \in E^\perp$, y puesto que un punto \mathbf{x} está dentro de la banda $S = E^\parallel \otimes \Omega$ solo si \mathbf{x}^\perp está dentro de la región de aceptación Ω , C_S no depende de \mathbf{x}^\parallel ($C_S(\mathbf{x}) = C_\Omega(\mathbf{x}^\perp)$), por tanto $C_S^*(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k}^\parallel) C_\Omega^*(\mathbf{k}^\perp)$. El hecho de que ρ^* depende solo de \mathbf{k}^\parallel es un resultado de la proyección sobre E^\parallel , puesto que proyectar equivale a tomar $\mathbf{k}^\perp = \mathbf{0}$.

Todo el problema consiste en calcular $C_\Omega^*(\mathbf{k}^\perp)$, pues la región de aceptación depende claramente de la dimensión de la red y es, en general, un politopo de dimensión $d = N - n$.

El cálculo de esta expresión será importante para los fines de este trabajo si queremos conocer el patrón de difracción de las estructuras obtenidas sin necesidad de recurrir a una técnica de simulación. De manera que, para poder hacer un cálculo por computadora, nosotros proponemos (Aragón *et al.*, 1989) que una buena aproximación puede ser sustituir este politopo por una hiperesfera K de un cierto radio R , de tal suerte que si hacemos $K \approx \Omega$, la función característica es ahora:

$$C_K(\mathbf{x}^\perp) = \begin{cases} 1 & \text{si } x^\perp \leq R \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

donde x^\perp es la magnitud del vector \mathbf{x}^\perp .

La transformada de Fourier de esta función característica es:

$$C_K^*(\mathbf{k}^\perp) = \int_K \exp(-2\pi i \mathbf{k}^\perp \cdot \mathbf{x}) d^d \mathbf{x}$$

que puede resolverse usando coordenadas esféricas en d dimensiones ($d=N-n$), obteniéndose:

$$C_K^*(\mathbf{k}^\perp) = (R/k^\perp)^{d/2} J_{d/2}(2\pi k^\perp R) \quad (2)$$

donde $J_{d/2}$ es la función de Bessel de orden $d/2$. Se puede confirmar que si la banda se traslada por un vector $\mathbf{t} \in E^\perp$, la ecuación (2) se debe multiplicar por un factor $\exp(-2\pi i \mathbf{k}^\perp \cdot \mathbf{t})$.

Consecuentemente, de (1) y (2) obtenemos finalmente:

$$\rho^*(\mathbf{k}^\perp) = \mu^*(\mathbf{k}^\perp) \cdot [\delta(\mathbf{k}^\perp) (R/k^\perp)^{d/2} J_{d/2}(2\pi k^\perp R)]$$

Este es un resultado completamente general en el sentido de que es válido para cualquier dimensión de la red, y es de gran utilidad para implementar el cálculo de patrones de difracción, de estructuras proyectadas, en computadora.

En lo que concierne al método de corte, este resultado es válido si la decoración es perpendicular a E , esto es, si $\mathcal{A} \subset E^\perp$, pues en este caso los métodos son equivalentes. La situación es diferente en el caso más general en que la decoración también tiene componentes sobre E , $\mathcal{A} \subset \mathbb{R}^N$. Omitimos la discusión de este punto debido a que en este trabajo tendremos que vernos solo con decoraciones que están dentro del primer caso: $\mathcal{A} \subset E^\perp$.

III.4 Variables hidrodinámicas de cuasicristales.

La aplicación de la teoría de transiciones de fase de Landau ha significado un importante progreso en el campo de los cuasicristales, no solo en lo que se refiere a la estabilidad de esta nueva fase, sino

también en la formulación de una teoría de defectos y propiedades elásticas de cuasicristales.

La teoría de Landau resuelve la cuestión de, a qué fase ordenada condensa un líquido isotrópico que se encuentra por debajo de una temperatura crítica T_c (Landau y Lifshitz, 1959). En la aproximación más simple, la fase ordenada es descrita en términos de una energía libre de Landau F , que puede expandirse en una serie de potencias $F^{(k)}$ de la función densidad de masa de la estructura:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{L}^*} \rho_{\mathbf{k}} \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

donde \mathbf{k} es un vector recíproco y \mathcal{L}^* es la red recíproca. Cada $\rho_{\mathbf{k}}$ es un número complejo con una amplitud $|\rho_{\mathbf{k}}|$ y una fase $\phi_{\mathbf{k}}$. Los coeficientes de la serie $F^{(k)}$ dependen del sistema físico, y la minimización de F se efectúa en función de $|\rho_{\mathbf{k}}|$, $\phi_{\mathbf{k}}$ y el conjunto de vectores recíprocos \mathbf{k} .

En principio, todos los términos de la serie $F^{(k)}$ deben ser incluidos en la expresión de F . En la práctica, la estabilidad de un estado ordenado se estudia truncando la expresión de F de manera que incluya sólo los términos de más peso. De esta manera, F es minimizada como una función de $|\rho_{\mathbf{k}_n}|$, $\phi_{\mathbf{k}_n}$ y un subconjunto $\{\mathbf{k}_n\}$ de vectores recíprocos. El objetivo es hallar si el estado de equilibrio corresponde a un conjunto de \mathbf{k}_n (con valores de $|\rho_{\mathbf{k}}|$ diferentes de cero) que describe el estado cuasicristalino, o si algún otro conjunto $\{\mathbf{k}_n\}$, asociado con algún estado cristalino, es preferido. Sin embargo, esta truncación de la serie representa el más serio inconveniente de este tratamiento, pues no es realmente claro que todos los cálculos que se han realizado (Kalugin, *et al.* 1985, Bak, 1985, Biham, *et al.*, 1986, etc.) describan los sólidos reales observados en el laboratorio.

Esta formulación es útil, por otro lado, para identificar las variables hidrodinámicas de la fase cuasicristalina, hallando las invariancias de F (Levine *et al.*, 1985, Bak, 1985). Se encuentra que la minimización de F fija todas las $|\rho_k|$ y las ϕ_k , excepto para 4 fases, en el caso pentagonal, y 6 fases para el icosaedro. Una parametrización conveniente de estas fases es dada por

$$\phi_k = u \cdot k'' + w \cdot k^\perp \quad (3)$$

con las definiciones de k'' y k^\perp dadas en la sección anterior (véase, por ejemplo: Steinhardt y Ostlund, 1987, y Gómez *et al.*, 1987). Los desplazamientos fonónicos o fonones u son el equivalente, en el caso periódico, a traslaciones de toda la estructura. Las variables w , llamadas fasones, describen rearrreglos de las posiciones relativas de los átomos.

Así, por ejemplo, para el caso icosaedro, la expresión (truncada) de la función densidad de masa puede escribirse como

$$\rho(r) \propto \sum_{n=1}^6 \cos(k_n \cdot r + \phi_{kn})$$

donde $\{k_n\}_{n=1}^6$ son los vectores que señalan los vértices del plano superior de un icosaedro. Si cada vector k se asocia con la base de una red en 6D, como se describió en la sección anterior, los desplazamientos u y w dados por (3) pueden interpretarse como desplazamientos de la superficie de corte en las direcciones de E y E^\perp , respectivamente.

Esta interpretación ha sido muy fructífera para el estudio de las propiedades elásticas de los cuasicristales, y para reproducir el desorden que se observa en las estructuras reales. Será importante también, y recurriremos a ella, en una parte más avanzada de este trabajo.

III.5 El método de corte y los modelos de cuasicristales.

Después de la discusión de las secciones anteriores, es muy claro lo importante que sería para un modelo de cuasicristal el poder generar sus estructuras no periódicas por medio de un corte o una proyección de estructuras periódicas. Aunque estos métodos fueron, en principio, desarrollados para generar cuasiredes perfectas, es posible adaptarlos a los modelos aleatorios y también, como veremos al final de este trabajo, al modelo DR.



Figura 6. Regiones de aceptación para generar cuasicristales por corte y proyección. (a) Icosaedro rómbico. (b). Triacontraedro rómbico.

Una cuasired perfecta en 3D puede obtenerse por corte y proyección en 6D si la banda es generada por traslación del cubo unitario Π_6 sobre E^6 (Katz y Duneau 1986). La región de aceptación Ω es un triacontraedro rómbico (Fig.6a) que se obtiene al proyectar Π_6 sobre E^4 , de donde podemos deducir, haciendo $A=\Omega$, que esta cuasired también puede obtenerse cortando un cristal en 6D que consiste de triacontraedros centrados en los vértices de \mathbb{Z}^6 y orientados en la dirección de E^4 .

De manera semejante, el adoquinado original de Penrose se puede obtener cortando con un plano un cristal en 5D, que consiste en icosaedros rómbicos (Fig.6b) centrados en los vértices de \mathbb{Z}^5 y orientados en la dirección de E^4 .

La implementación no es tan directa para los modelos aleatorios

debido al desorden que les caracteriza. Una generalización conveniente al caso del cuasicristal perfecto, en que la estructura se obtiene cortando con una superficie hiperplanar (con una sola orientación), consiste en considerar que el desorden puede reproducirse si se corta con una superficie "arrugada", esto es, una superficie cuya orientación fluctúa alrededor de la orientación ideal (Elser, 1985, 1987, Strandburg, 1989).

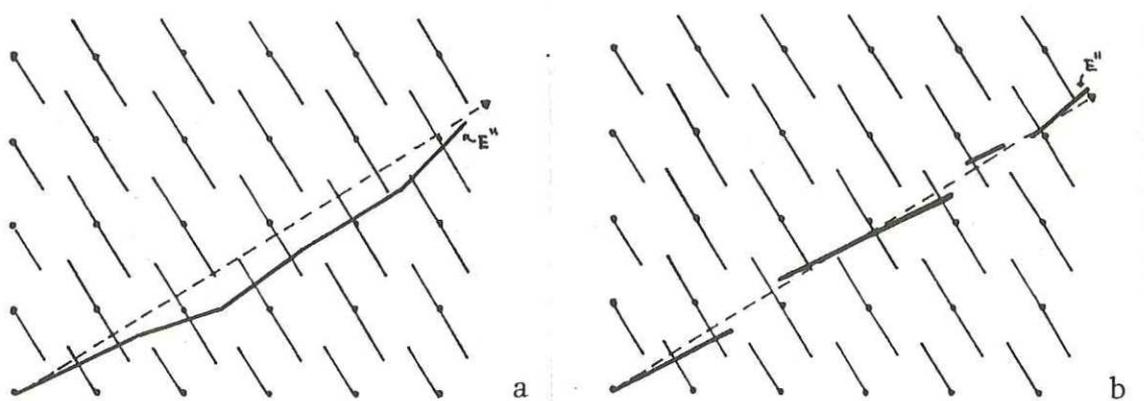


Figura 7. Ejemplo en 2D de la línea de corte para obtener: (a) un cuasicristal aleatorio y (b) un vidrio icosaedral.

El ejemplo de la red en dos dimensiones servirá para aclarar este punto. En la Figura 7a se muestra el equivalente al caso del cuasicristal aleatorio; la línea de corte ideal (punteada) sufre cambios en su orientación irracional dando lugar a la línea "arrugada", pero siempre continua, que servirá para generar el desorden que se desea.

Es importante mencionar que la orientación de la superficie de corte se fija por consideraciones de simetría, de manera que los cambios en su orientación dan lugar a alteraciones de la simetría orientacional de la estructura. Sin embargo, puesto que esta desviación fluctúa alrededor de la orientación adecuada, la estructura mantiene la simetría orientacional ideal en un sentido de promedio estadístico

Por otra parte, el orden traslacional de largo alcance depende de las fluctuaciones de la superficie en la dirección E^{\perp} . Para asegurarse de que el orden traslacional no se destruya, se aplican técnicas de mecánica estadística (Henley, 1988) para encontrar una superficie con fluctuaciones mínimas que aseguren la existencia de orden traslacional.

El vidrio icosaedral puede obtenerse si se permite que la superficie tenga discontinuidades como en la Figura 7b, pues la estructura resultante tendrá huecos que serán llenados, como el modelo sugiere, con un arreglo amorfo de átomos. En este caso, las fluctuaciones de la orientación de la superficie son mínimas, con lo que se garantiza la simetría orientacional. No sucede lo mismo con las fluctuaciones sobre E^{\perp} que pueden ser arbitrariamente grandes afectando sensiblemente el orden traslacional. Debido a la clase más general de desorden inherente a este modelo, no existe un tratamiento analítico de estas fluctuaciones y se tiene que recurrir, como se mencionó en el capítulo anterior, a una simulación numérica que no involucra espacios de dimensión 6, para mostrar la existencia de orden traslacional en la estructura (Stephens y Goldman, 1986).

Para terminar este capítulo, conviene agregar que, como tratamos de mostrar, el formalismo de espacios de dimensión mayor en la teoría de los cuasicristales se ha convertido en una técnica indispensable. Es por eso, que una interpretación de esta naturaleza pretendemos dar a las estructuras generadas con el modelo DR, de tal suerte que pueda ser utilizada como recurso teórico para un estudio comparativo de este modelo y para una descripción exacta de muchas propiedades que, de otra manera, se ven afectadas por el tamaño finito de las estructuras generadas.

IV ESTRELLAS Y DIFRACCION DE CUASICRISTALES DR.

Después de la discusión del capítulo anterior, no podemos dejar de advertir que un modelo de cuasicristal que no pueda ser visto dentro del contexto de espacios de dimensión superior se priva de una poderosa, y a la vez elegante, herramienta de apoyo. Esto significa que si el modelo DR es, como se ha argüido, un buen modelo en el sentido de que reproduce los resultados experimentales y además unifica a los demás modelos, no puede carecer de una formulación de este tipo.

Estudiaremos en este capítulo la cuestión de las estrellas utilizadas por el modelo DR y su proyectabilidad. Esto servirá para establecer resultados de fundamental importancia para el siguiente capítulo, en donde se plantea el formalismo de corte para generar esta clase de estructuras. Si bien se considera solo la fase icosaedral, siempre que es posible se procede con toda generalidad con el fin de establecer los fundamentos para el estudio de otras fases.

IV.1 Estrellas eutácticas

Cuando se discutieron en el capítulo anterior los métodos de proyección, con toda intención se dejó a un lado la cuestión de cómo se selecciona la orientación del espacio real o superficie de corte. En realidad la orientación queda definida de manera única al escoger la simetría de la estructura proyectada, como puede probarse utilizando argumentos de teoría de grupos (Janssen, 1988, Levitov y Rhyner, 1988). Sin embargo, podemos prescindir en este momento de la esta teoría y

seguir un camino más llano, completamente algebraico, para formular nuestros resultados.

La simetría de una estructura no periódica la podemos definir por medio de un conjunto de vectores que señalen las direcciones en que están orientados los enlaces entre los vértices de la estructura. Denotaremos por $\{a_i\}_{i=1}^N$ a tal conjunto y le llamaremos **estrella**. Generalmente, los vectores estrella son los vectores base que sirven, en espacio recíproco, para indizar el patrón de difracción de la estructura considerada, por lo que en la fase icosaedral $\{a_i\}_{i=1}^6$ son vectores, en el espacio real, que señalan los vértices del plano superior de un icosaedro (Fig.10).

Si $\{a_i\}_{i=1}^N$ es una estrella en \mathbb{R}^n , con $N \geq n$, $\{e_i\}_{i=1}^N$ la base canónica (ortonormal) de \mathbb{R}^N y si denotamos por P'' y P^\perp los operadores de proyección sobre E'' y E^\perp , respectivamente, el espacio real E (de dimensión n) es aquel en el que la base de \mathbb{R}^N proyecta en la estrella, esto es, en el que se cumple que para cada i $P''(e_i) = a_i$, $i=1..N$. De este requerimiento se puede deducir que los elementos de la matriz asociada con el proyector P'' están dados por $P''_{ij} = a_i \cdot a_j$ (Aragón, 1988), por lo que una base para el espacio E son los n renglones linealmente independientes (rango) de P'' .

Puede suceder sin embargo que, para una estrella dada, no exista un espacio en el que se cumpla $P''(e_i) = a_i$, para toda i , en otras palabras que la estrella $\{a_i\}_{i=1}^N$ no puede obtenerse proyectando una base ortonormal. Una estrella $\{a_i\}_{i=1}^N$ que se obtiene de la proyección de una base ortonormal $\{e_i\}_{i=1}^N$ se denomina **estrella eutáctica normalizada**.

Dada una estrella $\{a_i\}_{i=1}^N$, podemos saber si es eutáctica normalizada por medio del **teorema de Hadwiger** (Coxeter, 1973) que enunciamos sin prueba:

Teorema 1 (Teorema de Hadwiger). Sea $T = \sum_{j=1}^N a_j a_j$ una transformación vectorial lineal que transforma cualquier vector $x \in \mathbb{R}^n$ en $Tx = \sum_{j=1}^N a_j a_j \circ x = \sum_{j=1}^N (a_j \circ x) a_j$. La estrella $\{a_j\}_{j=1}^N$ en \mathbb{R}^n es eutáctica normalizada si y solo si $Tx = x$ para cualquier $x \in \mathbb{R}^n$.

Puede probarse sin dificultad que la estrella de la fase icosaedral, 6 vectores de un icosaedro, es eutáctica normalizada, lo cual no representa problema pues implica que puede obtenerse proyectando una base ortonormal de \mathbb{R}^6 que genera una red cúbica en donde se aplica un método de corte para obtener los demás puntos de la estructura. Pero este no es siempre el caso, para otras estructuras, como la fase decagonal (Al-Fe y otras) (Bendersky, 1985), la estrella asociada no es eutáctica normalizada, por lo que la estructura no puede obtenerse de una red cúbica.

Como consecuencia, creemos importante contar con un criterio adecuado para estrellas no eutásticas con el que podamos deducir las magnitudes de la base de \mathbb{R}^N , o en otras palabras, deducir los parámetros de la red en \mathbb{R}^N (pues en este caso no es cúbica).

Con este fin, proponemos una generalización del teorema de Hadwiger a redes ortorrómbicas (o bases ortogonales) que será de utilidad no solo para conocer los parámetros de la red desde donde se debe proyectar, sino también, como veremos en la siguiente sección, para escoger sin ambigüedad la base para indizar¹ los patrones de difracción de las estructuras GR y, en general, de los cuasicristales experimentales (Aragón *et al.*, 1989a, 1989b).

¹ Utilizamos el verbo "indizar" como el equivalente en español del inglés "indexing".

La generalización que proponemos puede resumirse en un solo teorema, el teorema 2, cuya demostración se muestra en el anexo A para no perder la continuidad de la exposición.

Si $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^N$ es una base ortorrómbica de \mathbb{R}^N con $\|\varepsilon_i\|=\lambda_i$, entonces:

Teorema 2. La estrella $\{a_i\}_{i=1}^N$ en \mathbb{R}^n puede ser proyectada de una base ortorrómbica en \mathbb{R}^N si y solo si existen números positivos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ tal que, para cualquier $P \in E$ ($\mathbb{R}^N = E \oplus E^\perp$) se cumple

$$P = \sum_{i=1}^N \frac{P \cdot a_i}{\lambda_i} \frac{a_i}{\lambda_i}. \quad (4)$$

Dada una estrella $\{a_i\}_{i=1}^N$, el teorema anterior nos dice si puede ser proyectado de una red ortorrómbica. Si este es el caso, la ecuación 4 es la base para un procedimiento computacional por medio del cual podemos calcular los coeficientes λ_i .

Sea $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^N$ una base ortonormal de E , entonces de la ecuación 4 (véase también Ec. A.1 del anexo A) se tiene que para toda j ($j=1, 2, \dots, n$):

$$\varepsilon_j = \sum_{i=1}^N \frac{\varepsilon_j \cdot a_i}{\lambda_i} \frac{a_i}{\lambda_i}$$

multiplicando por ε_k :

$$\varepsilon_j \cdot \varepsilon_k = \delta_{kj} = \sum_{i=1}^N \frac{\varepsilon_j \cdot a_i}{\lambda_i} \frac{\varepsilon_k \cdot a_i}{\lambda_i}$$

definiendo $M_{ij} = \varepsilon_i \cdot a_j$ y $D_i = 1/\lambda_i^2$, tenemos:

$$\delta_{jk} = \sum_{i=1}^N M_{j1} M_{ki} D_i \quad (5)$$

que es un conjunto de $n \times n$ ecuaciones lineales para las N incógnitas D_i . Dado que no todas las $n \times n$ ecuaciones son independientes, es posible que el sistema no tenga solución o si la tiene, puede no ser única.

Cualquiera que sea el caso, la técnica de la **matriz inversa generalizada** (Mackay, 1977) es la más adecuada para resolver este problema, pues nos permite detectar si tiene o no solución y en caso de tener más de una, nos da aquella que hace mínima la norma euclídeana $\sum_{i=1}^N |D_i|^2$.

Una aplicación muy importante de estos resultados se presenta en la siguiente sección.

IV.2 Criterio de indización de los patrones de difracción

Los cuasicristales (y, en general, las estructuras inconmensuradas) tienen la propiedad de que los puntos de su patrón de difracción pueden generarse como combinaciones enteras de al menos 4 vectores racionalmente independientes², esto es, cada vector de la transformada de Fourier del cuasicristal es de la forma:

$$k = \sum_{i=1}^N m_i a_i^* \quad m_i \text{ enteros, } N > 3.$$

y no hay enteros m_i ($i=1,2,\dots,N$) tales que $\sum_{i=1}^N m_i a_i^* = 0$. Si $N=3$ se tiene una estructura periódica.

En otras palabras, la red recíproca de un cuasicristal es generada por un conjunto $\{a_i^*\}_{i=1}^N$ de vectores racionalmente independientes. Partiendo de la definición de independencia racional se puede probar que esta clase de redes tienen las siguientes propiedades (Rokhsar *et al.*, 1987):

1. Los puntos k llenan densamente el espacio.
2. Si escogemos un conjunto generador de la red, cualquier otro

² N vectores son racionalmente independientes si cualquier combinación lineal de ellos, con coeficientes racionales, es cero si y solo si todos los coeficientes son cero.

conjunto adecuadamente escalado también es válido (si se trata de estructuras con simetría 5, el factor de escala es de la forma τ^n , $n \in \mathbb{Z}$). Por esta propiedad, se dice que estas redes poseen simetría de inflación.

Esto acarrea serias dificultades a la interpretación de los patrones de difracción de los cuasicristales pues en primer lugar, los puntos de difracción llenan densamente el espacio (en un patrón experimental solo aparecen los de mayor intensidad) por lo que no se pueden encontrar los vectores "más pequeños" de la red recíproca y, en segundo lugar, no se puede escoger una base única para indizar el patrón de difracción.

J.W. Cahn *et al.* (1986) proponen una forma de eliminar la ambigüedad en la indización que es válida solo para los cuasicristales icosaedrales que pueden obtenerse por el método de corte y proyección. El problema es que, como mencionamos en la Sección III.1.1, este método no es el más general y, lo que es peor, para otras fases como la decagonal, aún no se tiene certeza sobre el tipo de red en 6D asociada con la estructura real de esta fase.

Motivados por las consecuencias del teorema 2, nosotros proponemos una forma alternativa de resolver este problema de ambigüedad usando información experimental del espacio real de la estructura considerada. Esta técnica es especialmente adecuada para indizar los patrones de difracción de los cuasicristales DR, pues en este caso se conoce la posición de los átomos, esto es, se tiene toda la información en espacio real. La validez del método, sin embargo, se extiende a todo tipo de estructura en donde se tenga información de espacio real (usando microscopía de alta resolución, por ejemplo).

La ventaja de formular el problema en espacio real es que ahí el conjunto de vértices de una estructura cuasicristalina no es denso sino que forma lo que se denomina un **sistema de Delaunay** (Galiulin, 1980) que es un conjunto discreto de puntos en donde se se pueden encontrar vectores mínimos que reflejen la simetría de la estructura. Nuestra propuesta es que los recíprocos de estos vectores mínimos sean los vectores base de la indización. El problema es ¿ como pasar del espacio real al espacio recíproco ?.

En el caso de cristales, el patrón de difracción se puede indizar con 3 vectores que son a la vez una base del espacio recíproco y el paso del espacio real al recíproco (o viceversa) se realiza por medio de la transformación lineal
$$\mathbf{e}_i^* = \sum_{j=1}^3 (g_{ij})^{-1} \mathbf{e}_j$$
 (el asterisco denota a los vectores del espacio recíproco) donde $g_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$ es el tensor métrico (Coxeter, 1988). Esta clase de transformación es imposible en el caso de cuasicristales en que una base del espacio recíproco consiste de más de 3 vectores racionalmente independientes. Sin embargo, podemos darle la vuelta a este problema de la siguiente manera: (1) Definimos una estrella $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^N$ de N vectores en el espacio real. (2) Encontramos la base $\{\boldsymbol{\varepsilon}_i\}_{i=1}^N$ de una red de dimensión N que proyecte en ella, usando el procedimiento computacional asociado al teorema 2. (3) Se obtiene la red recíproca $\{\boldsymbol{\varepsilon}_i^*\}_{i=1}^N$ (que ahora si se puede hacer vía un tensor métrico pues estamos en N dimensiones), y (3) De la proyección $\mathbf{a}_i^* = P \boldsymbol{\varepsilon}_i^*$ se obtiene la estrella en espacio recíproco $\{\mathbf{a}_i^*\}_{i=1}^N$ que puede ser la base, deducida sin ambigüedad, para indizar el patrón de difracción del cuasicristal asociado a la estrella $\{\mathbf{a}_i\}_{i=1}^N$. En la Figura 8 se muestra un diagrama de este procedimiento en donde se indica, con la línea punteada, el camino

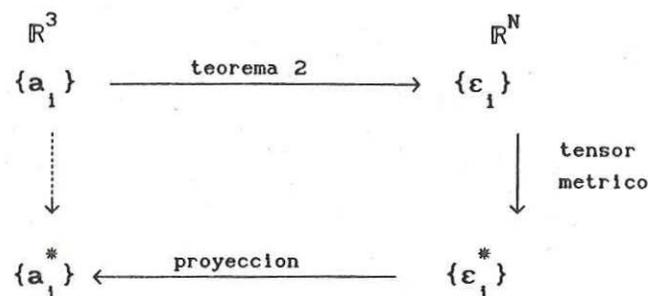


Figura 8. Paso del espacio real al recíproco via la red en 6D

que no es factible y con la línea continua el que nosotros proponemos.

Ejemplo 1. La estructura de Penrose en 2D, aunque carece de interés práctico, servirá como un primer ejemplo de aplicación de nuestro criterio. La estrella asociada con la estructura (Fig.1) es $\mathbf{a}_n = a(\cos 2\pi n/5, \sin 2\pi n/5)$, $n=1,2,\dots,5$, que señala los vértices de un pentágono, es eutáctica por lo que puede proyectarse de una red cúbica de 5 dimensiones. Sin embargo, sólo 4 vectores de esta estrella son racionalmente dependientes, como podemos inferir del hecho de que $\sum_{n=1}^5 \mathbf{a}_n = 0$, por lo que otra opción consiste en asociar con la estructura una estrella que consista de solo 4 vectores de la estrella original (Janssen 1986). Sea $\{\mathbf{a}_n\}_{n=1}^4$ tal estrella, aplicando el teorema 2 podemos confirmar que no es eutáctica pero que puede obtenerse como proyección de una celda ortorrómbica en 4D con parámetros $\lambda_1 = \lambda_4 = (1/a^2)A$ y $\lambda_2 = \lambda_3 = (1/a^2)A\tau^2$, donde $a = \|\mathbf{a}\|$, $A = (\tau+2)^{-1}$ y τ es "la razón áurea" definida anteriormente. La red recíproca a la generada por esta celda es también ortorrómbica con parámetros $\lambda_1^* = \lambda_4^* = a^2(\tau+2)$ y $\lambda_2^* = \lambda_3^* = a^2(3-\tau)$. Proyectando de regreso a \mathbb{R}^2 se obtiene una estrella en el plano recíproco que también consiste de 4 vértices de un pentágono pero ahora escalados a un tamaño $a_n^* = \sqrt{1 + 1/(a^2 \sqrt{5} (\tau+2))}$. Esta estrella puede utilizarse para indizar el

patrón de difracción del adoquinado de Penrose y una vez que se especifique el valor del parámetro "a" de la estructura real, la estrella $\{a_n^*\}_{n=1}^4$ en el espacio recíproco queda definida sin ambigüedad.

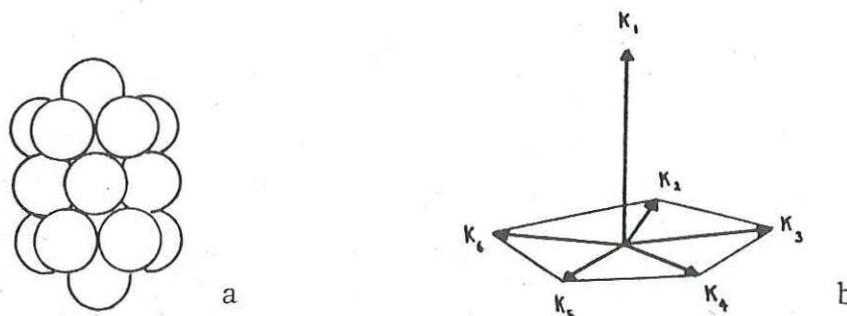


Figura 9. Estrellas para la fase T; (a) Para el modelo DR.
(b) Para indizar el patrón de difracción.

Ejemplo 2. La estructura de la fase decagonal o fase T (Bendersky, 1985) también puede ser obtenida por el método recursivo usando como estrella un arreglo cilíndrico de 19 átomos (segundo número mágico) como el que se muestra en la Figura 9a (Romeu, 1988b). Nosotros podemos escoger una estrella más simple que refleje la simetría de esta estructura y ésta puede ser la que se muestra en la Figura 9b (Aragón *et al.*, 1989b) que consiste de 5 vectores coplanares de tamaño $\|k_i\|=k$ ($i=1, \dots, 5$) y un vector normal de tamaño k_0 que corresponde a la distancia A-B (Figura 9a). Esta estrella no es eutáctica pero si usamos el teorema 2, resulta que se puede proyectar de una celda ortorrómbica con parámetros $\lambda_1 = \dots = \lambda_5 = k\sqrt{5/2}$ y $\lambda_6 = k_0$. La recíproca a la red generada por esta celda es también ortorrómbica con parámetros $\lambda_1^* = \dots = \lambda_5^* = (1/k)\sqrt{2/5}$ y $\lambda_6^* = 1/k_0$. Proyectando a 3D se obtiene una estrella en espacio recíproco

con una geometría similar a la del espacio real (Fig.9b) pero con 5 vectores coplanarios de tamaño $(1/k)(2/5)$ que señalan los vértices de un pentágono regular, y un vector perpendicular de tamaño $1/k_0$. Esta estrella tiene la misma geometría que la propuesta, partiendo de consideraciones en espacio recíproco, por T.C.Choy *et.al* (1988) para indizar el patrón de difracción de la fase T, solo que en nuestro caso fué deducida a partir de la estrella en espacio real.

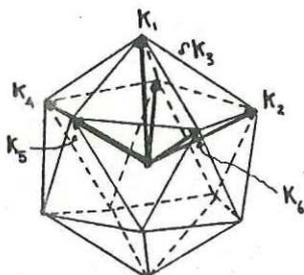


Figura 10. Estrella icosaedrica.

Ejemplo 3. Finalmente, consideraremos el caso de la fase icosaedrica que, aunque trivial, será de utilidad más adelante. La estrella asociada con la estructura real son los vectores que señalan 6 vertices del plano superior de un icosaedro: $\mathbf{a}_n = a((2/\sqrt{5})\cos(2\pi n/5), (2/\sqrt{5})\sin(2\pi n/5), 1/\sqrt{5})$ para $n=1,2,\dots,5$ y $\mathbf{a}_6 = a(0,0,1)$. Esta estrella es eutáctica por lo que puede obtenerse de la proyección de una celda cúbica de 6D con parámetro $\lambda = a\sqrt{2}$. Repitiendo el procedimiento de los ejemplos anteriores, se llega a que la correspondiente estrella en espacio recíproco es también un icosaedro pero de tamaño $1/2a$.

Para finalizar esta discusión, es importante mencionar que de todas las posibles estructuras que se pueden generar con el método recursivo es posible que en algunas de ellas el crecimiento se inicie con una semilla

a la que se asocie una estrella que no sea eutáctica normalizada ni proyectable de alguna red ortorrómbica, aunque hasta ahora no se haya presentado algún caso. Si esto sucede, este proceso de "levantar" la estrella y verla como la proyección de una red de dimensión superior, debe ser llevado a una etapa más general en donde se consideren bases no necesariamente ortogonales.

V.2 Difracción del cuasicristal básico icosaedral

Un razonamiento simple basado en la comparación del patrón de difracción cinemático del CBI y el de un cuasicristal perfecto resultó ser de lo más revelador acerca de la estructura en 6D del primero. La Figura 11a muestra el patrón de difracción de un CBI de 517 átomos. Sea r_0 la distancia entre el origen y el primer anillo de reflexiones, medido con una escala arbitraria. Ahora, la Figura 11b muestra el patrón de difracción de 525 átomos de un cuasicristal perfecto obtenido proyectando puntos de una red cúbica unitaria de 6D; si medimos con la misma escala la misma distancia para este patrón de difracción, esta resulta ser $2r_0$ (en este caso el anillo que tiene la misma intensidad relativa que el anterior es el segundo). En ambas estructuras en la primera celda se tiene un icosaedro unitario (ICO1 en el CBI) y dado que hay una relación recíproca entre las distancias de las reflexiones y el tamaño de la estructura, esto quiere decir que si reescalamos por dos el cuasicristal perfecto, el radio r_0 será el mismo para ambas estructuras y habrá perfecto ajuste en las posiciones de los puntos de difracción. La implicación es inmediata: en el CBI la cuasired que está difractando se forma de puntos que pertenecen a la familia de un icosaedro de tamaño 2, esto es, del ICO2!, y lo demás es la decoración de esta red. Esto significa que debemos considerar una red en 6D de tamaño 2 cuya base proyecte en ICO2 y los demás puntos ICO1 y DODE deberán provenir de una adecuada decoración de ésta.

Esta conclusión se puede confirmar usando un razonamiento diferente: las intensidades relativas de los picos de difracción de rayos X del CBI

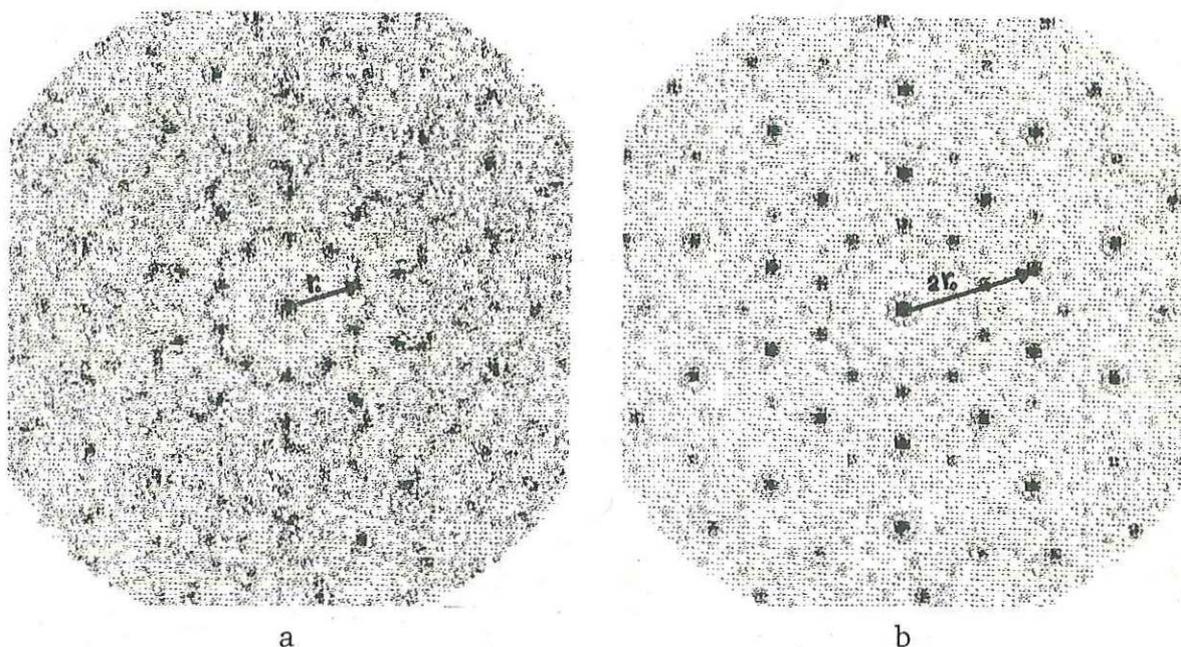


Figura 11. Patrón de difracción cinemático de 517 átomos de un CBI (a), y de 525 átomos de un cuasicristal perfecto (b).

sigue sigue el mismo patrón que el encontrado experimentalmente por P.A.Bancel *et al.* (1985), de manera que nosotros podemos identificar el pico más intenso y la reflexión que le corresponde de acuerdo con el resultado experimental. Si ahora reescalamos la estructura de manera que la distancia entre el átomo central y cualquiera del ICO1 sea 2.864 Å (que es la distancia interatómica más corta en aluminio FCC) y utilizamos el esquema de indización propuesto por Cahn *et al.* (1986), se puede inferir que utilizando el método de corte y proyección, la estructura puede obtenerse de una red cúbica en 6D con parámetro $\lambda=7.87$ Å, lo que implica (vease ejemplo 3) que la estrella en el espacio real es un icosaedro de tamaño 5.57 Å, que es el tamaño de ICO2 (Aragón *et al.*, 1990b).

Las consecuencias de este resultado van más allá de sólo mostrar la

clase de red que se debe considerar en 6D; nos indica que una forma adecuada de proceder consiste en decorar la red en 6D y después proyectar, esto es, nos divorcia del método convencional que consiste en que una vez que se tiene una cuasired en 3D, obtenida por proyección o cualquier otra técnica, se resuelva el problema de cómo decorarla. En este último caso, la decoración debe ser un motivo que se repita idénticamente en todas las celdas del mismo tipo o en todos los vértices de la estructura; si en cambio decoramos la red en 6D, esto no es necesariamente cierto.

V.3 Decoración de la hiper-red: El cristal en 6D

Una vez que conocemos el parámetro de la red que debemos considerar, deducir cuál debe ser la decoración no presenta dificultad alguna. En primer lugar, sabemos que la base de la red (de tamaño 2) proyecta en el IC02, entonces todos los vértices de esta red deben estar decorados. Por otro lado, es claro que si tuvieramos una red unitaria, la base proyectaría en el IC01, de aquí que la decoración que da lugar a la familia del IC01 debe estar en una red unitaria que se puede formar al colocar átomos en los puntos medios de los lados de una red de tamaño 2. Finalmente, el DODE es el dual del IC01, y sus vértices se obtienen tomando dos terceras partes de la suma de los 20 tripletes de los vectores que forman las caras del icosaedro (véase ecs. 6), por lo que en 6D, la decoración debe estar en $2/3$ de la diagonal de 20 "caras" de dimensión 3 que se forman al tomar 20 tripletes de la base de \mathbb{R}^6 con sus negativos (realmente son 220 los posibles tripletes de la base de \mathbb{R}^6 y

sus negativos que se pueden tomar para formar caras de dimensión 3, pero no se consideran todas las posibilidades, de la misma manera como en un icosaedro no cualquier triplete de vectores forma una cara de éste).

En suma, el cristal en 6D se va a formar de repetir en todo los vértices de la red el motivo formado por 44 "superficies atómicas" (véase Sección III.1.2); 12 que dan lugar al ICO2 (la base de \mathbb{R}^6 escalada a 2 y sus negativos), 12 del ICO1 (la base de \mathbb{R}^6 y sus negativos) y 20 del DODE (2/3 de 20 tripletes de la base de \mathbb{R}^6 y sus negativos).

En lo que se refiere a la forma de estas superficies atómicas, este es un problema que está lejos de ser trivial. Sin embargo, como una primera aproximación, podemos suponer que se trata de esferas sólidas centradas en los puntos que acabamos de enumerar y orientadas en la dirección de E^\perp . El radio de estas esferas se puede deducir si encontramos las distancias que hay entre sus centros y el plano E ; si la esfera tiene como radio al menos la menor de estas distancias, podemos estar seguros que el plano E intersectará estas superficies.

A manera de ejemplo, consideremos una superficie atómica correspondiente a la familia del DODE; sabemos que es una esfera centrada a 2/3 de la suma de uno de los 20 tripletes de la base de \mathbb{R}^6 . Si $(e_1 e_2 e_6)$ es uno de estos tripletes (en la Figura 10 este punto corresponde al vértice del dodecaedro que está sobre la cara del icosaedro formada por los vértices $a_1 a_2 a_6$), el centro de la esfera tendrá coordenadas $g=(2/3, 2/3, 0, 0, 0, 2/3)$. La distancia de este punto al plano E se obtiene de la magnitud del vector g^\perp : la proyección sobre E^\perp . Utilizando la matriz de proyección P^\perp definida por $P_{ij}^\perp = \delta_{ij} - a_i \cdot a_j$, donde $\{a_i\}_{i=1}^6$ son los vértices de un icosaedro (véase Sección IV.1), se obtiene que esta

proyección está dada por: $g^\perp = 1/\sqrt{20}(c, c, -2/3, 2/3, -2/3, c)$, $c = 2(2\tau + 3)/3$, por lo que: $(g^\perp)^2 = \|g^\perp\|^2 = 2(7 - 4\tau)/15$, que es el cuadrado de la distancia de g al hiperplano E ". Una esfera centrada en g y con un radio de, al menos g^\perp , seguramente se intersectará con E ".

Repetiendo este cálculo para cada uno de los centros de las esferas se obtiene el conjunto de superficies atómicas que formarán el motivo del cristal de 6 dimensiones, mismo que se muestra en la Tabla I.

Podemos también generar el cristal en 6D por la repetición periódica de un hipercubo de tamaño 2 decorado con hiperesferas en: los 64 vértices, la mitad de los 192 lados y a $2/3$ y $4/3$ de las diagonales de 80 de las 160 "caras" de dimensión 3.

Tabla I. Superficies atómicas (hiperesferas) que forman el motivo que genera el cristal en 6D. Los corchetes indican que se trata de una familia de posiciones.

FAMILIA	POSICIONES	RADIO
ICO1	$\{\pm 1, 0, 0, 0, 0, 0\}$	$1/\sqrt{2}$
DODE	$2/3\{\pm 1, \pm 1, 0, 0, 0, \pm 1\}$	$(2(7-4\tau)/15)^{1/2}$
ICO2	$\{\pm 2, 0, 0, 0, 0, 0\}$	$\sqrt{2}$

V.4 El hiperplano de corte

El siguiente paso, cortar el cristal descrito en la sección anterior, presenta algunas diferencias que nos obligarán a generalizar el esquema tradicional de corte por una "superficie plana". Antes de entrar en detalles, es conveniente notar que la decoración que estamos

proponiendo para el cristal en 6D consiste de esferas orientadas solo en la dirección de E^\perp , en tal caso, como se discutió en la Sección III.1.2, es equivalente utilizar el método de corte o el de corte y proyección. En la discusión que sigue si en algunos casos nos referiremos específicamente a un método, es solo porque en ese se puede ver con más claridad la idea que tratamos de transmitir, si embargo, no debemos perder de vista la equivalencia de ambos métodos (de hecho, en la sección anterior aprovechamos esta situación para pasarnos de un método a otro).

En el método de corte y proyección, los puntos $(\mathbb{Z} \cap S)$ de la red $\mathbb{Z} = \mathbb{Z}^6$ se encuentran dentro de la banda $S = \Omega \otimes E''$ y dan lugar, al proyectarlos sobre E'' , a una cuasired perfecta, (Fig. 4). Si en lugar de proyectar $(\mathbb{Z} \cap S)$ sobre E'' lo hacemos sobre el complemento ortogonal E^\perp , el resultado será una distribución densa de puntos dentro de la region acotada Ω que se ha denominado región de aceptación. En el caso de la estructura de Penrose, la región de aceptación es un triacontraedro rómbico (Fig.6b).

Mencionamos esto porque podemos hacer un experimento útil con la CBI que consiste en "levantar" la estructura a \mathbb{R}^6 y observar si los puntos resultantes se encuentran dentro de una banda. Claramente, podemos cerciorarnos de esta situación si al proyectar estos puntos sobre E^\perp se obtiene una región acotada. Levantar la CBI a 6D no es inmediato pues esto sería posible solo si el operador de proyección fuera invertible, sin embargo debido a que sabemos que la CBI proviene de puntos con coordenadas enteras, podemos hacer una argucia numérica, válida solo para cuasiredes icosaedrales, que se basa en el siguiente razonamiento: si $\{a_i\}_{i=1}^6$ es la estrella que consiste de los 6 vértices superiores de un icosaedro, cualquier punto x de la familia del IC01 o IC02 de la CBI

puede escribirse como $\mathbf{x} = \sum_{j=1}^6 m_j \mathbf{a}_j$, donde el conjunto $\{m_j\}_{j=1}^6$ son enteros que pueden verse como las coordenadas de un punto $\mathbf{g} \in \mathbb{Z}^6$, esto es, $\mathbf{g} = \sum_{j=1}^6 m_j \mathbf{e}_j$ (en tal caso $\mathbf{x} = \mathbb{P}''(\mathbf{g})$, como puede comprobarse del hecho de que $\mathbb{P}''(\mathbf{e}_j) = \mathbf{a}_j$), por lo que el problema se reduce a, dado \mathbf{x} , encontrar el conjunto de enteros $\{m_j\}_{j=1}^6$. Si en la expresión de \mathbf{x} tomamos el producto escalar por cada uno de los vectores de la estrella, se obtiene:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{a}_k = m_k + \sum_{j=1}^5 m_j \mathbf{a}_j \cdot \mathbf{a}_k \quad (j \neq k, \quad k=1,2,\dots,6) \quad (7)$$

dado que en el caso de los vértices de un icosaedro $\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{a}_k$ es un múltiplo semientero de τ , como puede confirmarse tomando en cuenta que $\cos(36^\circ) = \tau/2$, la ecuación (7) puede escribirse como:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{a}_k = m_k + n_k \tau/2 \quad (k=1,2,\dots,6) \quad (8)$$

De esta manera, los valores m_k pueden encontrarse por una aproximación numérica barriendo enteros m y n dentro de un cierto rango hasta que la ecuación 8 se satisfaga para cada k . Si el punto \mathbf{x} es de la familia del DODE, no se llegará a una solución razonable de estas ecuaciones, que ya no son válidas para este caso. No es difícil convencernos que, de acuerdo a las ecuaciones (6), para los puntos de la familia del DODE se debe cumplir:

$$\frac{3}{2}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{a}_k) = m_k + n_k \tau/2 \quad (k=1,2,\dots,6)$$

con lo que completamos el esquema. Con esta técnica es posible levantar la CBI de manera única (debido a la irracionalidad del corte), salvo una constante de escalamiento.

Aplicando este procedimiento, una CBI de 517 puntos fué levantado a \mathbb{R}^6 y despues proyectado sobre E^\perp , resultando, como se esperaba, una estructura en 3D con simetría icosaedral, cuya proyección sobre un plano

perpendicular al eje de simetría 5 se muestra en la Figura 12. Sobre esa misma figura se esboza, con línea continua, lo que sería la región de aceptación para una cuasired perfecta, esto es, un triacontraedro rómbico visto desde el eje de simetría 5. Como puede observarse, en este caso hay gran cantidad de puntos que quedan fuera del triacontraedro, y no solo eso, se comprobó que la región de aceptación crecía sin aparente límite conforme se aumentaba el tamaño de la CBI. Esta observación arrojó un resultado decisivo para nuestros fines, a saber, que la región de aceptación no estaba acotada para la CBI, o lo que es equivalente, que la CBI no podía obtenerse por la técnica usual de corte y proyección.

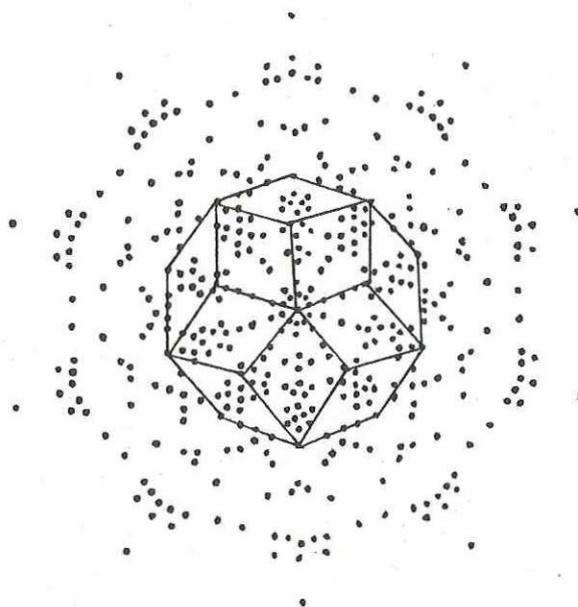


Figura 12. Proyección sobre E^\perp de 517 puntos de una CBI, en un plano normal al eje de simetría 5. Se indica la región de aceptación de un cuasicristal perfecto.

La posibilidad que de inmediato se presenta para eliminar esta complicación consiste en trabajar únicamente con el método de corte

considerando decoraciones o superficies atómicas que no estuvieran restringidas a E^1 , con lo que se elimina el problema de la región de aceptación no acotada ya que el método de la banda no tiene sentido en este caso. No con poca resistencia se tuvo que desistir de esta opción pues, además del hecho de que la decoración tiene ahora 6 dimensiones, como resultado del tamaño del CBI, se contaba solo con una colección finita de puntos con los que se debía derivar la superficie que los contenía, con lo que la tarea de deducir la decoración atómica se convertía en algo fuera de nuestro alcance.

Una segunda posibilidad consistía en tratar de obtener la estructura que nos interesa por medio de un corte de un cuasicristal (no cristal) en 4D, tal como fué propuesto por Elser y Sloane (1987). Estos autores generan un cuasicristal en 4D proyectando una red cúbica de 8 dimensiones. Esta estructura consiste de un apilamiento no periódico del politopo de 600 celdas o {335} en la simbología de Schäfli (Coxeter 1973) (este politopo es una configuración en 4D de 600 tetraedros, llamados celdas, dispuestos de manera que cada cara triangular pertenece a dos celdas y cada arista a 5 celdas), por lo que una estructura centrosimétrica de este tipo contiene como primer "casarón" a este politopo. El hecho importante es que una sección tridimensional de esta estructura (haciendo cero la cuarta coordenada) es una cuasired icosaedrales que tiene la propiedad de que la sucesión de capas alrededor del origen es precisamente icosaedro-dodecaedro-icosaedro pero, como esta sucesión proviene de los tres primeros cortes del politopo {335}, sus radios son, respectivamente, de 1, 1.47 y 1.62 que difieren notablemente de los radios del CBI y no hay ninguna transformación topológica sobre

esta estructura que nos permitan ajustarlos.

Después de esto, la moraleja fué clara: había que abandonar el esquema convencional de corte por una superficie hiperplana y en su lugar considerar discontinuidades de esta superficie de tal suerte que, en el esquema de corte y proyección, la banda se desplaza a diferentes posiciones en la red y se aceptan puntos que de otra forma quedarían fuera de una banda generada convencional. Tenemos ya un antecedente de esta posibilidad en el caso del cuasicristal aleatorio en el que la superficie es "arrugada" en lugar de hiperplana (Sección III.5) si bien, como veremos en seguida, la superficie que nosotros proponemos difiere notablemente de la del cuasicristal aleatorio.

Encontramos que una manera natural de deducir la forma de la superficie de corte consiste en reproducir la secuencia del crecimiento recursivo en 6 dimensiones, esto es, trasplantamos el modelo recursivo a 6D de una manera tal que conserva su validez para cualquier estructura que pueda ser generada con este método.

Con la intención de hacer más evidente el proceso conviene recordar brevemente el método recursivo aplicado en especial a la generación de la CBI (Romeu, 1989). Una vez que adoptamos la estrella de 44 vértices, el primer paso consiste en trasladarla a los puntos O que, como mencionamos en la Sección V.1, son de la familia del IC02, por lo que en esta primera iteración la estrella se traslada a los vértices del IC02. En seguida se eliminan los puntos que quedan arbitrariamente cerca y se procede por segunda ocasión a trasladar repetidamente la estrella sobre los nuevos puntos O que se generaron en el proceso anterior, se eliminan los puntos cercanos y de esta manera se puede repetir el proceso un número infinito

de veces.

La manera de como se puede calcar este proceso a 6D se podrá apreciar si recurrimos a un ejemplo en 2 dimensiones que, aunque incongruente en este caso, resulta ser bastante ilustrativo. En la Figura 13 se muestra una secuencia de cuadros en los que, del lado izquierdo se ilustran tres pasos del método recursivo aplicado a una estrella de 6 vértices con los puntos O provenientes de la subestrella más grande, del lado derecho se ilustra el equivalente a cada paso pero como proyección de una red de dos dimensiones (es esta la incongruencia de que hablabamos pues este último proceso arroja una cuasired en 1D no, como suponemos, en 2D). Para completar la analogía, la red en 2D se toma de tamaño 2 y se supone que la proyección de los vértices de la celda genera a la subestrella mayor, por lo que la pequeña se obtiene de proyectar los puntos medios de los lados de esta celda (la base unitaria). El proceso se interpreta como sigue: en el cuadro A tenemos simplemente la estrella que se obtiene proyectando solamente los vértices de la red y la base unitaria (A'), en seguida, esta estrella se traslada a un punto O_1 (B), lo que corresponde a trasladar la banda al punto de la red que proyecta en ese punto O_1 (B'). En este momento, el proceso de eliminar los puntos que no sean coincidencias puede verse que corresponde a eliminar la parte de la banda que se traslapa con la original. El último paso consiste en trasladar nuevamente la estrella a algún punto O_2 obtenido en el proceso anterior y eliminar los puntos que no coinciden (C), que puede verse también como una nueva traslación de la banda a otro punto de la red y la eliminación del traslape (C').

El aspecto final de la banda se muestra en la Figura 14a en donde,

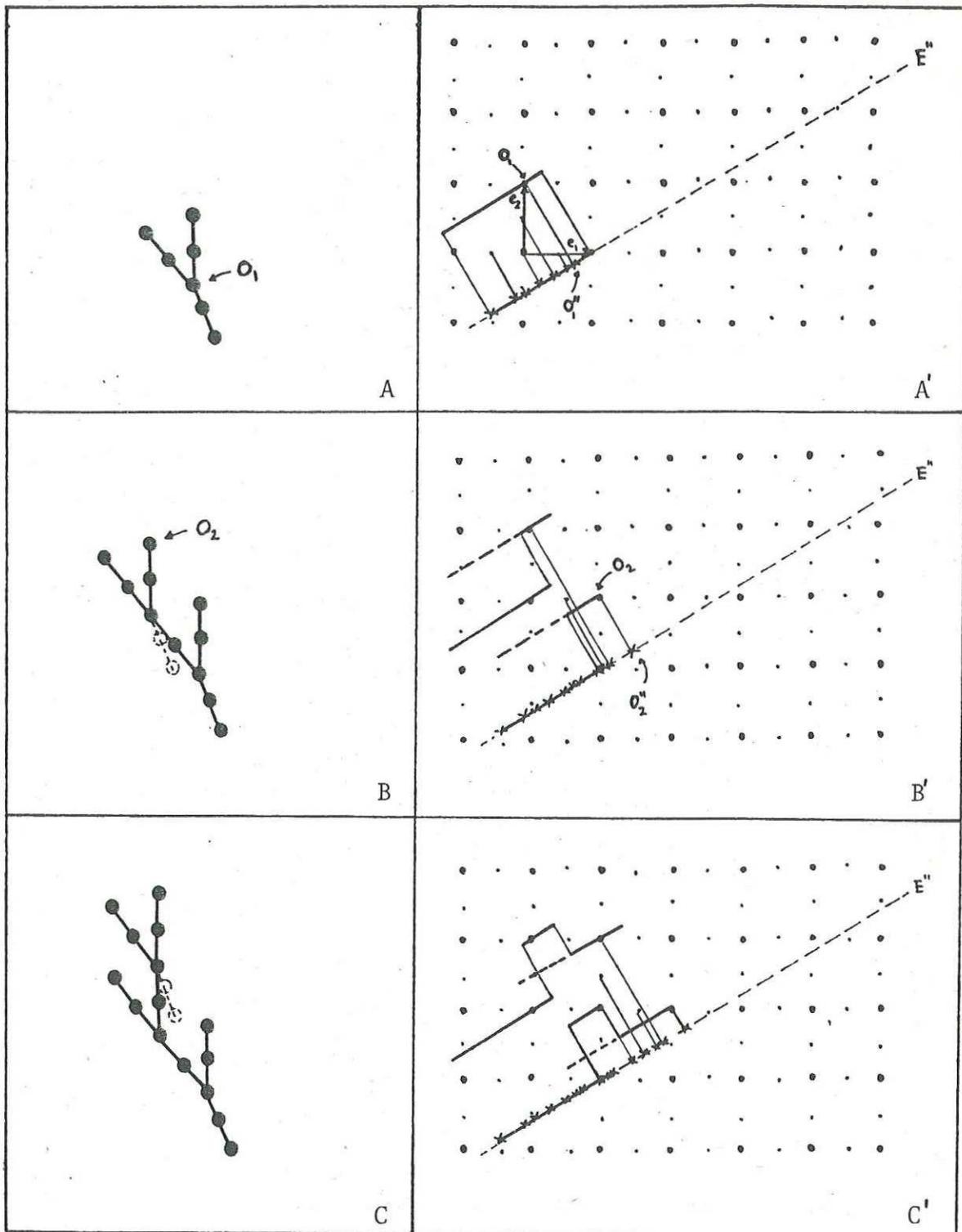


Figura 13. (A, B y C) son la ecuencia del método recursivo en 2D para una estrella triangular. (A', B' y C') son el equivalente a cada paso en el esquema de corte y proyección (véase texto).

con línea discontinua, se distingue la banda original. En la Figura 14b se muestra como sería la "línea" de corte en este caso si se piensa en el método de corte. Con este procedimiento, dado que se trata de una réplica en más dimensiones, podemos generar cualquier estructura que pueda obtenerse con el método recursivo.

Numerosos comentarios pueden derivarse de esta técnica de corte que proponemos. Enseguida dedicaremos algunas secciones a los que en nuestra opinión tienen especial interés.

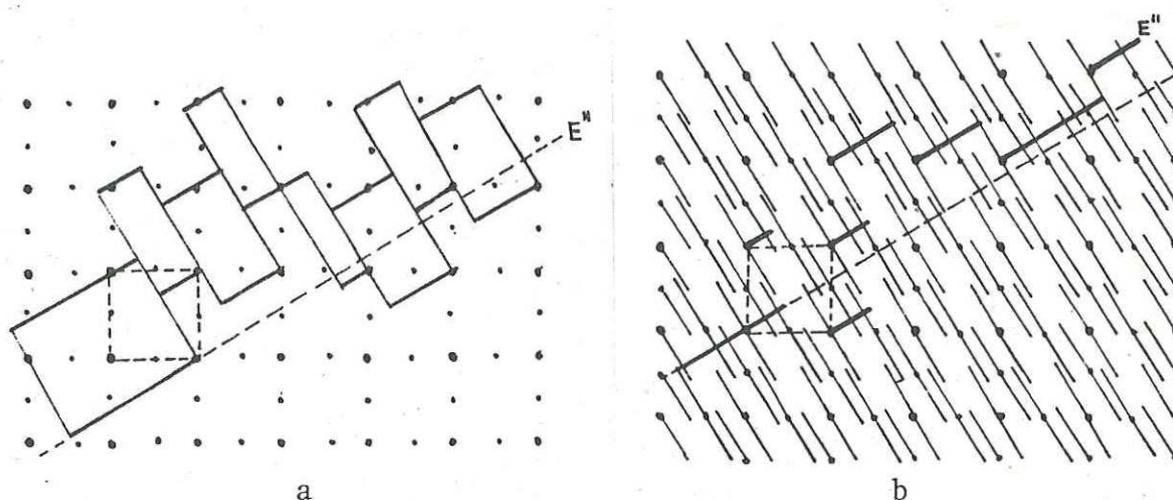


Figura 14. Ejemplo en 2D de la banda (a) o de la línea de corte (b) en la técnica de proyección que proponemos.

V.4.1 El patrón de difracción

El efecto de estas discontinuidades de la banda se refleja de manera muy clara en el patrón de difracción de la estructura resultante ocasionando un ensanchamiento de los puntos de difracción. Podemos convencernos de este hecho atendiendo el siguiente razonamiento.

La transformada de Fourier de una estructura obtenida por proyección está dada, como vimos en la Sección III.3, por la restricción a k'' de la

siguiente convolución:

$$\rho^*(\mathbf{k}) = \mu^*(\mathbf{k}) \circ [C_S^*(\mathbf{k})]$$

donde $\mu^*(\mathbf{k})$ es la transformada de Fourier de la densidad de masa $\mu(\mathbf{x})$ de la red \mathcal{L} y $C_S^*(\mathbf{k})$ es la transformada de Fourier de la función característica de la banda S que, en el caso del cuasicristal perfecto, está definida por:

$$C_S(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in S \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Si recurrimos al ejemplo en 2D, podremos apreciar mejor el procedimiento; la densidad μ es una red cuadrada de deltas de Dirac, por lo que su transformada de Fourier es también una red cuadrada de deltas. El segundo paso es la convolución con la transformada de Fourier de la función característica de la banda que, para este caso, es:

$$C_S(x^\perp) = \begin{cases} 1 & \text{si } x^\perp \in \Omega \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

donde Ω , la región de aceptación, es en este caso el segmento $[0, K]$, siendo K el ancho de la banda. El cálculo es directo puesto que se trata de un producto: en la dirección \mathbf{x}'' el resultado es una delta $\delta(\mathbf{k}'')$ (dado que C_S solo depende de \mathbf{x}^\perp) y en la dirección perpendicular es la función $\text{sen}(\pi k^\perp) / \pi k^\perp$ (salvo una constante). La convolución con la delta $\delta(\mathbf{k})$ tiene como efecto trasladar una copia de la anterior función a cada punto de la red recíproca. Finalmente, la transformada de Fourier de la estructura generada en la línea E'' es la restricción (a E'') que se obtiene tomando $\mathbf{x}^\perp = 0$ (Fig.15). Como podemos observar, debido a la irracionalidad del corte, la línea E'' toca a cada curva en un solo punto, lo que da lugar a un patrón de difracción consistente de puntos sin anchura, esto es, deltas.

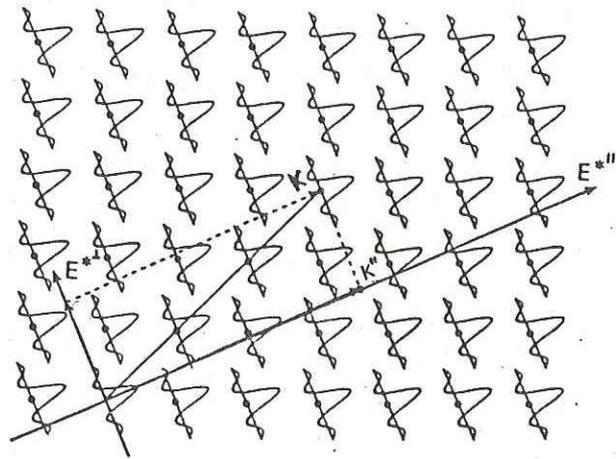


Figura 15. Ejemplo en 2D del cálculo de la transformada de Fourier de una cuasired en 1D obtenida por corte y proyección.

En el caso en que la banda tiene cortes como los que proponemos, la situación es diferente; el primer paso no se ve afectado, esto es, $\mu^*(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k})$, pero ahora la función C_S pierde su independencia en \mathbf{x}'' , transformándose en

$$C_S(\mathbf{x}'', \mathbf{x}^\perp) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x}^\perp \in \Omega + \mathbf{t}^\perp \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

donde \mathbf{t}^\perp , la componente sobre E^\perp del vector de traslación de la banda, es una función de \mathbf{x}'' . Así, refiriéndonos a la Figura 14a, si partimos del origen y \mathbf{o}_1'' es el primer punto O , se tiene $\mathbf{t}^\perp = 0$ si $\mathbf{x}'' \in [0, \mathbf{o}_1'']$. Como en este punto la banda debe ser trasladada por $\mathbf{t}^\perp = \mathbf{o}_1^\perp$, entonces si \mathbf{o}_2'' es el siguiente punto O , se tiene $\mathbf{t}^\perp = \mathbf{o}_1^\perp$ si $\mathbf{x}'' \in [\mathbf{o}_1'', \mathbf{o}_2'']$, y así sucesivamente. Como consecuencia, la función C_S^* , a diferencia del caso anterior, tendrá componentes en la dirección de E'' . La convolución con $\delta(\mathbf{k})$ llevará a cada punto de la red recíproca una copia de C_S^* que, al no estar orientada solo en E^\perp , puede ser cortada por E'' en dos puntos diferentes produciendo así un punto de difracción con anchura finita.

En consecuencia, un cuasicristal DR no es cuasiperiódico, desde el punto de vista matemático. La anchura de los puntos de difracción indica que se trata de una estructura que, si bien tiene orden orientacional de largo alcance, es desordenada.

Relacionado con este comentario, propondremos una idea que nos parece provechosa en la medida que puede llevarnos a caracterizar el desorden inherente a los cuasicristales DR.

La parte medular de nuestro razonamiento se encuentra en el cálculo analítico, por principio en el caso más sencillo de 2D, de la transformada de Fourier de la función $C_S(x'', x^\perp)$. El problema puede ser planteado de la siguiente manera. Supongamos que en $x''=0$ empezamos con la función $C_S(0, x^\perp)$ bien conocida, y que conforme nos desplazamos sobre x'' , al encontrarnos un punto 0, esta función puede desplazarse en la dirección E^\perp . Por principio, supongamos que la elección de los puntos 0 es aleatoria, esto es, que la probabilidad de que la banda se desplace hacia E^\perp es la misma para cada x'' . Esto puede llevarnos a establecer un proceso de Markov, en donde la posición actual de la banda solo depende del paso anterior, que puede ser convenientemente descrito por una función de correlación $\langle C_S(0, x^\perp), C_S(x'', x^\perp) \rangle$ (véase por ejemplo Reif, 1968, cap. 15), que se interpreta como un promedio de todas las posibles configuraciones. La transformada de Fourier que nos interesa está dada (DiVincenzo, 1986) por:

$$C_S^*(\mathbf{k}) = \int \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \langle C_S(0, x^\perp), C_S(x'', x^\perp) \rangle dx$$

Si aproximamos el comportamiento de la función de correlación por el de una caminata aleatoria en 2D, se presenta el problema de que la banda puede regresar en la dirección $-x''$ y traslaparse así con la anterior.

Esto se resuelve si restringimos la caminata a la dirección x^\perp y asociamos x'' con la variable tiempo, esto es, describir el comportamiento de la banda por un movimiento Browniano en 1D, con lo que la función característica está dada por:

$$\langle C_S(0, x^\perp), C_S(x'', x^\perp) \rangle \approx (2\pi l_0 x'')^{-1/2} \exp(-x^{\perp 2} / l_0 x'') \quad (9)$$

donde l_0 es el "paso" de la caminata. Si tomamos l_0 como el parámetro de la red en 2D, esto nos lleva a la banda escalonada, que se muestra en la Figura 16, propuesta por DiVicenzo (1986). La transformada de Fourier de (9) es una función Lorentziana y puede probarse que el ancho de los puntos de difracción es solo función de k^\perp (referencia anterior), lo que caracteriza muy bien el desorden de los cuasicristales aleatorios y del vidrio icosaedral.

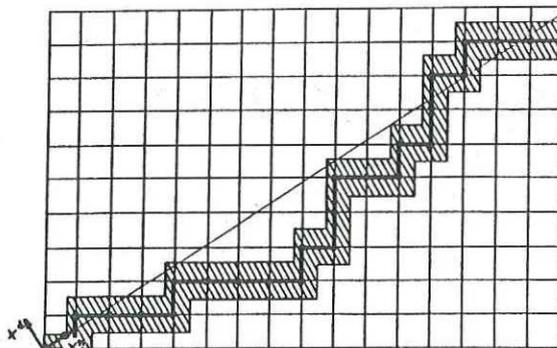


Figura 16. Banda aleatoria en 2D que sigue una estadística Browniana con el "paso" igual al parámetro de la red. (De DiVicenzo, 1986)

Como mencionamos en la Sección III.5, el desorden de estos cuasicristales proviene del rompimiento local de la simetría como resultado del cambio en la orientación de la banda, lo cual es cierto en este proceso, como puede visualizarse en la Figura 16. Sin embargo, en el caso de la banda que proponemos para los cuasicristales DR, a pesar de

estar escalonada, mantiene siempre la orientación irracional. La única manera de lograr esto en el esquema que acabamos de describir, es que el paso l_0 no sea igual al parámetro de red, sino una variable que dependa de x . De esta manera puede conseguirse que la banda se desplace solo en la dirección E^\perp sin verse forzada a "escalonar" solo por puntos de la red.

El desarrollo de esta última idea implica reformular el problema de la caminata aleatoria, ahora con el paso l_0 variable. Descontando las complicaciones que pueda presentar, creemos que el resultado no carecerá de importancia desde el momento en que podremos encontrar la dependencia del desorden de la estructura con las variables recíprocas de la red en 2D y, de esta manera, caracterizarlo.

V.4.2 Fonones y fasones

Una consecuencia interesante relacionada con las fases libres discutidas en la Sección III.4, puede derivarse del hecho de que los desplazamientos de la banda o, como será más conveniente a esta discusión, de la superficie de corte, son siempre por vectores de la red \mathfrak{L} (aquellos que proyectan en puntos O). Para empezar, dada una función cuasiperiódica en n dimensiones, de la forma:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathfrak{L}^*} \rho_{\mathbf{k}} \exp(2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (9)$$

donde \mathfrak{L}^* es la red recíproca generada por $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{a}_i^*$, existe una manera sistemática de relacionarla con una función periódica de dimensión N, que consiste en asociar a cada vector $\mathbf{k} \in \mathfrak{L}^*$ un vector $(\mathbf{k}, \mathbf{k}^\perp)$ de una red de dimensión N, en donde la función

$$\hat{\rho}(r_s) = \hat{\rho}(r, r^\perp) = \sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp[2\pi i(k \cdot r + k^\perp \cdot r^\perp)]$$

es periódica. La red es generada por la base $\{(a_1, a_1^\perp)\}$, recíproca a $\{(a_1^*, a_1^{*\perp})\}$, $i=1, \dots, N$, y la restricción al subespacio E'' , el espacio real, es simplemente $r^\perp=0$ (Janner y Janssen, 1979).

Si el subespacio E'' es trasladado por un vector $t(=t''+t^\perp) \in \mathbb{R}^N$, sabemos que la componente t'' parametriza los grados de libertad fonónicos, o fonones, mientras que los fonones se parametrizan con la componente t^\perp (Sección III.4). Puesto que en nuestro caso t es un vector de la red \mathcal{L} , se tiene $\hat{\rho}(r_s+t) = \hat{\rho}(r_s)$, o bien:

$$\sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp\{2\pi i[k \cdot (r+t'') + k^\perp \cdot (r^\perp + t^\perp)]\} = \sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp[2\pi i(k \cdot r + k^\perp \cdot r^\perp)]$$

en donde el lado izquierdo puede escribirse como:

$$\sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp\{2\pi i[k \cdot (r+t'') + k^\perp \cdot r^\perp]\} \times \exp(2\pi i k^\perp \cdot t^\perp)$$

Utilizando como recurso la unicidad de una serie de Fourier, podemos igualar coeficiente por coeficiente en la última igualdad, con objeto de intercambiar términos, y escribir

$$\sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp\{2\pi i[k \cdot (r+t'') + k^\perp \cdot r^\perp]\} = \sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp\{2\pi i[k \cdot r + k^\perp \cdot (r^\perp - t^\perp)]\}$$

La restricción a E'' ($r^\perp=0$) nos da:

$$\sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp[2\pi i k \cdot (r+t'')] = \sum_{k \in \mathcal{L}} * \rho_k \exp[2\pi i(k \cdot r - k^\perp \cdot t^\perp)]$$

o bien $\rho(r+t'') = \rho(r - t^\perp)$.

De esta última expresión, podemos inferir una importante característica de las estructuras generadas con el tipo de corte que proponemos, a saber, que los cambios en la estructura producidos por un desplazamiento fonónico también pueden producirse por un desplazamiento fonónico. Esto implica que el desorden inherente a los cuasicristales DR

puede ser totalmente descrito por medio de un campo fasónico, o bien por un campo fonónico, y no hay acoplamiento entre ambos grados de libertad, como en el caso del cuasicristal aleatorio.

Este último resultado no nos causa asombro, en la medida que, como mencionamos en la sección anterior, la fuente de desorden en ambos modelos es diferente.

En la Figura 17 se muestra el campo de desplazamientos fasónicos (o mapa fasónico) de la CBI proyectado en un plano perpendicular al eje 5 de simetría. Este campo se obtiene simplemente proyectando sobre E^{\perp} todos los desplazamientos de la banda, y es de gran utilidad si se desea aplicar la teoría de Landau para un estudio comparativo más detallado de la estabilidad energética de estas estructuras (véase por ejemplo Elser, 1988).

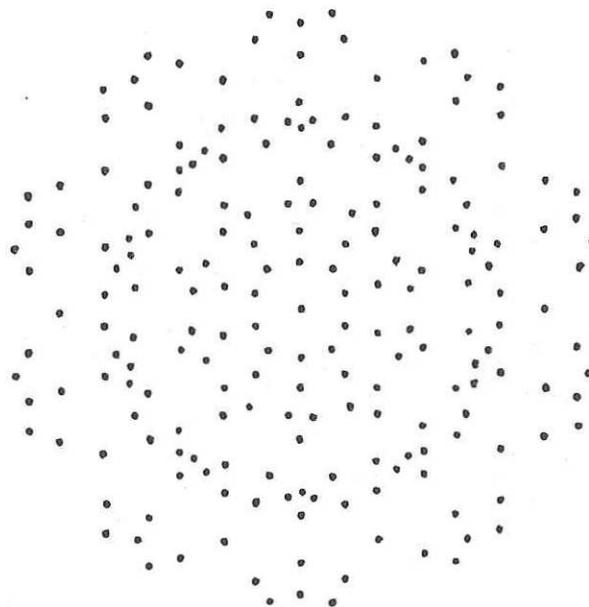


Figura 17. Mapa fasónico de 517 puntos de una CBI en un plano normal al eje de simetría 5.

V.4.3 Coherencia en las fronteras de corte

En el proceso real (con átomos) de crecimiento DR (Romeu, 1989), cuando la estrella se traslada a un punto O, no solamente resulta un gran número de coincidencias entre los átomos que ya existían y los que se acaban de agregar, sino que la frontera entre el cúmulo anterior y el nuevo es completamente coherente, en el sentido que hay coincidencias en esa zona y que el encaje es perfecto, pues los puntos O se localizan en posiciones que son centros de icosaedros incompletos ligeramente distorsionados. Además, como resultado de este hecho, la frontera es de baja energía, resultado que también se puede derivar del modelo de red de coincidencias (Ranganathan, 1966).

La coherencia en las fronteras es una cuestión un tanto obscura en el esquema de corte que proponemos en donde no es inmediato inferir porqué ocurre tal efecto (obviamente asumimos que existe desde el momento en que se generan las mismas estructuras que con el método DR). Nos limitaremos en este momento a presentar una idea que debe someterse a un estudio más serio, pero que ofrece posibilidades de aclarar este punto. La esencia de nuestro razonamiento se encuentra en la noción de dislocación de borde y su generalización a cuasicristales.

En un cristal perfecto, una dislocación de borde se genera si medio plano es insertado en la red cristalina. El defecto en si es la línea L que marca el extremo del plano extra (Weertman y Weertman, 1964). Un método general para construir dislocaciones es el proceso de Volterra (Friedel, 1967), que también puede ser aplicado a otro tipo de defectos como disclinaciones. El proceso de Volterra consiste de los siguientes

pasos (véase Figura 18):

1. Se corta el cristal por una línea arbitraria Σ_1 acotada por L (Fig. 18a).
2. Se genera una nueva línea Σ_2 por la traslación $\Sigma_2 = \Sigma_1 + \mathbf{b}$, donde \mathbf{b} es el vector de Burgers de la dislocación que debe ser un vector de la red (Fig. 18b).
3. Se elimina la materia que queda entre estas dos líneas y se unen nuevamente (Fig. 18c).

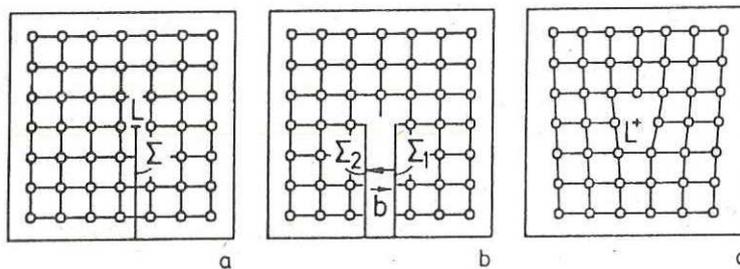


Figura 18. Proceso de Volterra para la construcción de una dislocación de borde en una red cuadrada. (De Bohsung y Trevin, 1988).

En un cuasicristal, un proceso de este tipo no puede llevarse a cabo en el espacio real debido a la ausencia de simetría traslacional, pero si da la idea de como proceder en la red periódica de más dimensiones, que genera la cuasired. La técnica está bien comprendida para el caso de la estructura de Penrose en 2D, en donde se pueden identificar cierta clase de franjas, como las que se muestran en la Figura 19, y la idea es remover media franja para luego unir. Cada franja corresponde a un hiperplano de la red de 5D que proyecta en la estructura (Gähler y Rhyner, 1986), de manera que remover una de ella es equivalente a remover un hiperplano en 5D. Sin embargo esto no es del todo válido, pues el resultado de unir la estructura, después de remover la mitad de una franja, produce una falla de apilamiento, más que un defecto puntual

(Bohsung y Trebin, 1988). Para superar esta dificultad se tiene que recurrir a manipulaciones (flexiones) de la banda en 5D que pasaremos por alto, ya que con esta información podemos elaborar el argumento que podría llevarnos a resolver el problema planteado inicialmente.

Es claro que si el proceso de Volterra (Fig.18) se realiza con una línea Σ_1 infinita, el resultado final será remover un plano completo del cristal y la estructura queda inalterada. Del mismo modo, podemos visualizar que si en la estructura de la Figura 19 removemos una franja completa, las partes resultantes pueden unirse coherentemente y solo habrá, en algunos casos, violaciones a las reglas de unión (defectos fasónicos). De la discusión anterior podemos inferir que quitar una franja completa de la estructura corresponde a eliminar un plano en 5D, esto es, a aplicar un proceso de Volterra en 5D con un hiperplano infinito Σ_1 . Esto no afecta a la red, pero no se puede decir lo mismo de la banda que, como resultado de eliminar un plano, se traslada por un

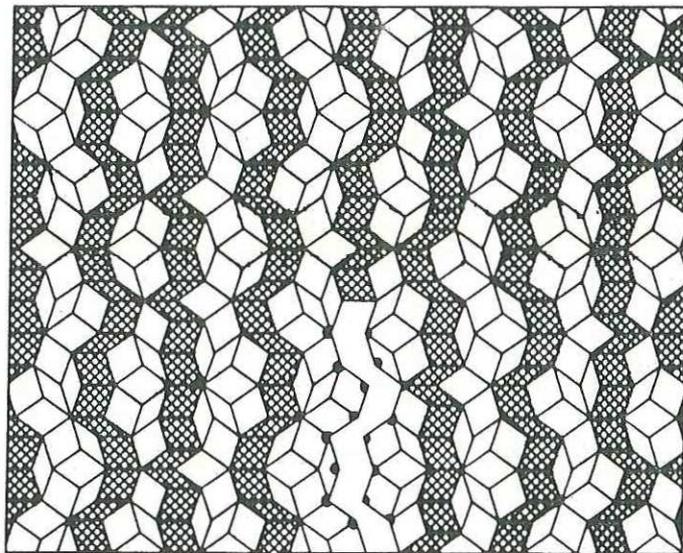


Figura 19. Algunas franjas de una estructura de Penrose en 2D. (De Bohsung y Trebin, 1988)

vector \mathbf{b} de esta red; el vector de Burgers.

Un ejemplo en 2D servirá para aclarar este punto. En la Figura 20 se muestra el proceso de Volterra aplicado a un red en 2D. Obsérvese que el resultado final (Fig.20b) no altera la estructura periódica, pero si produce una traslación de la banda por un vector de la red.

Si regresamos al caso de 5D e invertimos el proceso, podremos comprender el fondo de nuestro razonamiento: la traslación de la banda por un vector de la red puede verse como el resultado de eliminar una sección infinita de la red en 5D que, si corresponde a una franja en la estructura cuasiperiódica (Fig. 19), genera dos partes perfectamente coherentes.

Este enfoque, completamente geométrico, plantea el problema de que no podemos asegurar que el corte que se fuerza al llegar a un punto O corresponda a eliminar una franja de la cuasired. De manera intuitiva esperamos que esto sea así al tomar en cuenta que en el método DR no cualquier posición es "buena", desde el punto de vista de la coherencia, para trasladar la estrella; las posiciones adecuadas son precisamente las

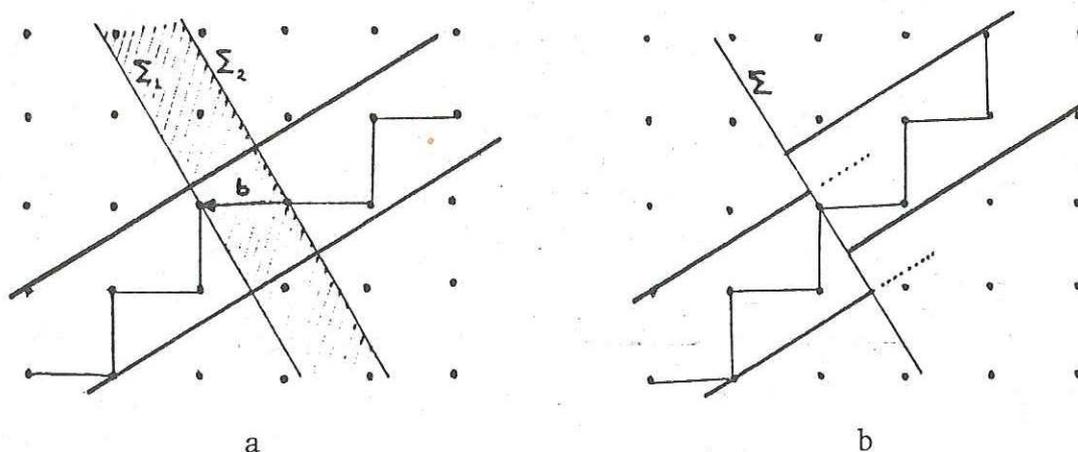


Figura 20. Proceso de Volterra aplicado a una red en 2D utilizada para generar una cuasired en 1D por corte y proyección.

de los puntos O . No obstante, creemos que un estudio más serio de esta idea puede clarificar el tema.

V.5 Un caso particular: El cuasicristal perfecto decorado

Para finalizar, mencionaremos un caso de particular interés que establece un nexo entre el cuasicristal perfecto y el DR. Al generar una cuasired icosaedral por corte y proyección, con la banda discontinua que proponemos, una opción interesante consiste en seleccionar como puntos O solo aquellos que estén dentro de la banda "ideal", esto es, dentro de la región $S = \Omega \otimes E$. Esto va a producir una banda discontinua cuyos desplazamientos se efectúan solamente en una vecindad de la banda ideal, y no van más allá (la Figura 21 muestra una analogía en 2D, obsérvese que los puntos que están dentro de la banda ideal son, por construcción, siempre aceptados).

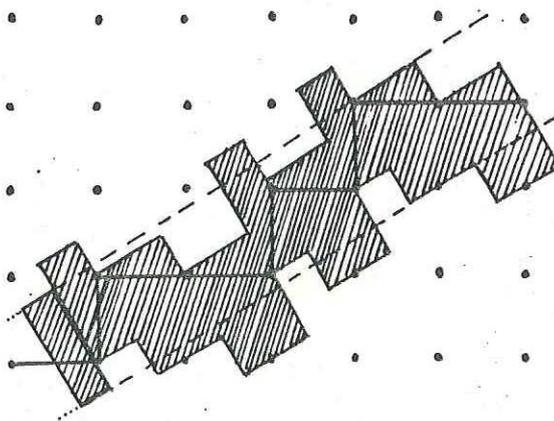


Figura 21. Ejemplo en 2D de un proceso recursivo en donde los puntos O pertenecen a una cuasired perfecta.

El resultado final es una estructura que tiene como subconjunto una cuasired de Penrose y que puede interpretarse como una cuasired perfecta escalada por 2 y "decorada" con el motivo IC01, DODE e IC02 en cada uno

de sus vértices (Romeu, 1988, Aragón *et al.*, 1989b). Este cuasicristal, al igual que el perfecto, es formado por apilamiento de dos diferentes romboedros pero, debido a la forma irregular de la banda (como resultado de la eliminación del traslape), estos no van a estar decorados de la misma manera en toda la estructura.

La Figura 22a muestra 200 átomos de este cuasicristal en un plano normal al eje de simetría 5. Debemos mencionar que una evidencia a favor de este tipo de estructura es que las posiciones de los átomos están en concordancia con las determinadas experimentalmente por Janot, *et al.* (1988) (véase Romeu, 1989). No es sorprendente entonces, que su patrón de difracción cinemático, que se muestra en la Figura 22b, sea prácticamente indistinguible del experimental.

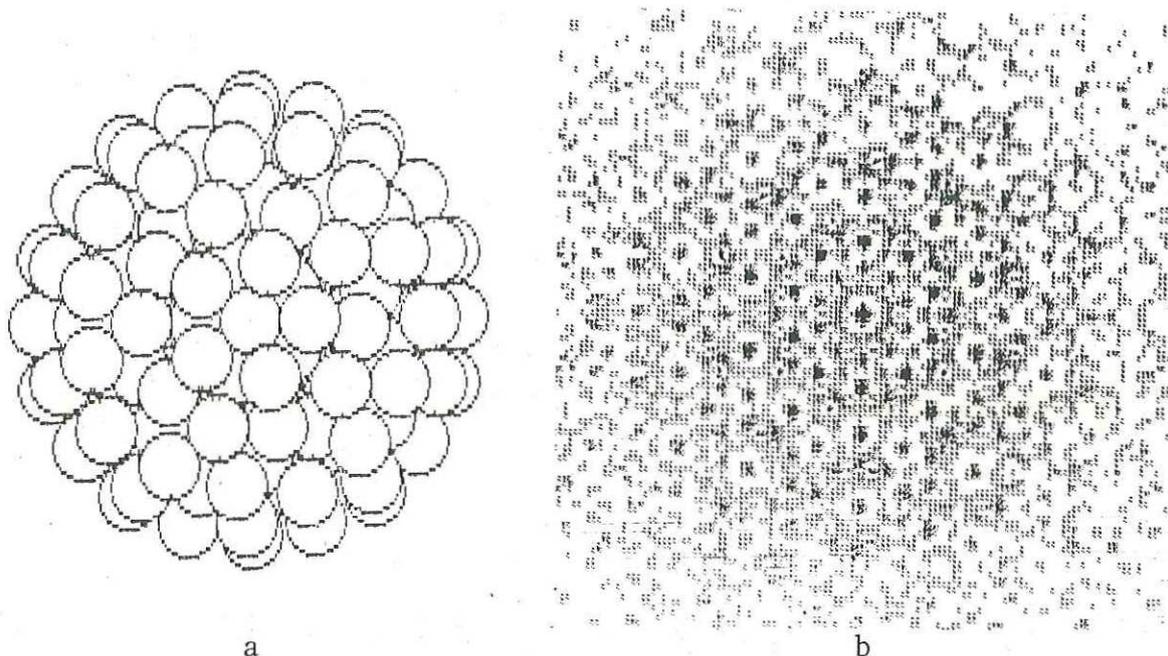


Figura 22. (a). 200 átomos de un cuasicristal perfecto decorado. (b). Patrón de difracción cinemático.

VI CONCLUSIONES

Con respecto a los otros modelos de cuasicristal, basados en técnicas de proyección, la generalización que nosotros presentamos en este trabajo, tiene la ventaja de su factibilidad física como resultado de que está respaldado por un mecanismo de crecimiento que ha probado su validez. Podrá apreciarse más claramente su relación con el modelo físico, en el momento que se trate con una aleación en particular. Una vez conocida la estequiometría, no es difícil deducir la clase de átomo que se asociará a cada superficie atómica del cristal en 6D que se describió en la Sección V.3 (tabla I). Algunos intentos en esta dirección fueron previamente hechos por Kalugin *et al.* (1986) y, posteriormente, por Bak y Goldman (1988) quienes proponen, para las aleaciones Al-Mn, una decoración de la celda unitaria en 6D que consiste de ciertas hipersuperficies atómicas de Mn en los vértices del hipercubo (unitario) y de Al en las posiciones $(1/2, 0, 0, 0, 0, 0)$ (es interesante notar la similitud con las posiciones de la decoración que proponemos en la tabla I, la diferencia se encuentra en que en nosotros consideramos un hipercubo de tamaño 2, en donde, además, se agregan las superficies que se encuentran en 80 caras de dimensión 3). De esta manera, el método adquiere más significado físico pues, al momento de cortar o proyectar, cada superficie atómica corresponderá a un átomo, de una clase bien definida, de la estructura real.

El método que presentamos, puede ser aplicado para la generación de cualquier estructura no periódica del tipo que propone el modelo DR y, en consecuencia, para la generación de estructuras no periódicas estables

bajo un potencial interatómico. Las posibilidades que nuestro método abre, son múltiples. En la Sección V.5 mostramos como puede obtenerse un cuasicristal perfecto con decoración; esto puede propiciar una situación más general, que consiste en generar, con un método como el GDM (véase Capítulo III), cuasicristales perfectos de diferentes clases de isomorfismo local que, una vez levantados a 6D, se utilicen como puntos O para cortar el cristal propuesto en la Sección V.3. De esta manera, superamos el inconveniente de que los métodos de proyección solo permiten obtener una sola clase de isomorfismo local de cuasicristales icosaedrales (esto es cierto para el método de corte siempre que la decoración sea ortogonal a E^h). Por otro lado, no hay impedimento para que en cada paso pueda modificarse la inclinación irracional de la banda, con lo que se produce, de esta manera, el desorden que caracteriza a los cuasicristales aleatorios. Y podemos ir más lejos aún, pues queda abierta la posibilidad de obtener partículas múltiplemente gemeladas, que también pueden ser crecidas usando el modelo DR (Romeu, 1989), lo que aumentaría la gama de aplicaciones novedosas que proponemos de los métodos de proyección. Todo esto es extensivo a todas las nuevas simetrías no cristalográficas que se han encontrado como, por ejemplo, la fase dodecagonal y octagonal.

En relación con el método en sí, un tema que promete consecuencias de fundamental interés, está relacionado con la trayectoria de la banda en el hiperespacio. Después de la discusión del Capítulo V, no podemos dejar de preguntarnos si existe un camino óptimo, desde el punto de vista físico, que la banda deba seguir. Atendiendo argumentos del modelo DR, nosotros proponemos una trayectoria marcada por los puntos O, ya que son

esos los que originan (en 3D) fronteras de baja energía, pero, si nos situamos en el hiperespacio, no se tiene una razón de esa naturaleza para que la banda adquiriera esa configuración, y si tomamos en cuenta que los desplazamientos fonónicos cuestan poca energía, es inevitable cuestionarnos sobre porqué no seguir otro camino. No es necesario insistir en la importancia que tendrá dilucidar esta interrogante; con ello se completaría todo un formalismo que emparenta de manera definitiva el modelo físico con el modelo matemático.

LITERATURA CITADA

Aragón, J.L. 1988. Un algoritmo general para obtener estructuras no periódicas por el método de la banda. Tesis de Maestría, Fac. Ciencias, U.N.A.M., México. 51 pp.

Aragón, J.L., A. Gómez y G. Vázquez Polo. 1989. A general cut and projection computational algorithm to construct quasilattices and their diffraction patterns. Third Int. Conf. on Quasicryst. and Icomm. Struct., Vista Hermosa, Mor., México.

Aragón, J.L., A. Gómez, D. Romeu y F. Dávila. 1990a. Unambiguous indexing of quasicrystals. Vector star selection. Scripta Met. En prensa.

Aragón, J.L., A. Gómez y D. Romeu. 1990b. Unambiguous indexing of icosahedral and decagonal phase quasicrystals. Scripta Met. En prensa.

Audier, M. y P. Guyot. 1986. Al₄ Mn quasicrystal atomic structure, diffraction data and Penrose tiling. Phil. Mag. Lett. 53(1): L43-L51.

Audier, M. y P. Guyot. 1988. A perfect icosahedral atomic structure: A two-unit-cell and four-zonohedra description. Phil. Mag. Lett. 58(1): 17-23.

Bak, P. 1985. Symmetry, stability, and elastic properties of icosahedral incommensurate crystals. Phys. Rev. B. 32: 5764-72.

Bak, P. 1986. Icosahedral crystals from cuts in six-dimensional space. Scr. Metall. 20(9): 1199-1204.

Bak, P. y A.I. Goldman. 1988. Quasicrystallography. p.143-170. En: Aperiodicity and order, vol.1. (M.V. Jarič y D. Gratias, eds.). Academic Press, inc., Boston. 285 pp.

Bancel, P.A., P.A. Heiney, P.W. Stephens, A.I. Goldman y P.M. Horn. 1985. Structure of rapidly quenched Al-Mn. Phys. Rev. Lett. 54(22): 2422-2425.

- Beltran del Rio, C.L. y A. Gómez. 1989. Self similar structures and pentagonal and decagonal coincidence lattices as models for quasicrystalline materials. Third Int. Conf. on Quasicryst. and Icomm. Struct., Vista Hermosa, Mor., México.
- Bendersky, L.A. 1985. Quasicrystal with one-dimensional translational symmetry and a ten-fold rotation axis. Phys. Rev. Lett. 55: 1461-1463.
- Bendersky, L.A. y M.J., Kaufman. 1986. Determination of the point group of the icosahedral phase in Al-Mn-Si alloy using convergent-beam electron diffraction. Phil. Mag. B. 53: L75-L80
- Biham, O., D. Mukamel y S. Shtrikman. 1986. Symmetry and stability of icosahedral and other quasicrystalline phases. Phys. Rev. Lett. 56: 2191-2194.
- Bohsung, J. y H.R. Trebin. 1988. Defects in quasicrystals. p. 183-221. En: Aperiodicity and order, vol.2. (M.V. Jarič y D. Gratias, eds.). Academic Press, inc., Boston. 226 pp.
- Cahn, J.W. y D. Gratias. 1986. A structural determination of the Al-Mn icosahedral phase. Jou. Physique Coll. C3, 47(7): 415-424
- Cahn, J.W., D. Shechtman y D. Gratias. 1986. Indexing of icosahedral quasiperiodic crystals. J. Mater. Res. 1(1): 13-26.
- Cartier, P. 1987. Classification des systèmes quasi cristallins de type icosaédrique. Acad. Sc. Paris, 304 II(14): 789-792.
- Cassada, W.A., G.J. Shiflet y S.J. Poon. 1986. Formation of an icosahedral phase by solid-state reaction. Phys. Rev. Lett. 56: 2276-2279.
- Coxeter, H.S.M. 1973. Regular polytopes. Dover, New York . 321 pp.
- Coxeter, H.S.M. 1988. Fundamentos de geometría. Limusa Wiley, México. 518 pp.

- Choy, T.C., J.D. Fitz Gerald y A.C. Kalloniatis. 1988. The Al-Mn decagonal phase. Part 3. Diffraction pattern simulation based on a new index scheme. *Phil. Mag. B*, 58(1):35-46.
- De Bruijn, N.G. 1981. Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane. *Proc. Serv. A*. 84(1): 39-66.
- DiVincenzo, D.P. 1986. Perfect and imperfect icosahedral solids and the projection method. *J. de Physique*, 47: C3-237-243.
- Duneau, M. y A. Katz. 1985. Quasiperiodic patterns. *Phys. Rev. Lett.* 54(25): 2688-2691.
- Elser, V. y C.L. Henley. 1985. Crystal and quasicrystal structures in Al-Mn-Si alloys. *Phys. Rev. Lett.* 55(26): 2883-2886.
- Elser, V. 1985. Comment on "Quasicrystals: A new class of ordered structure. *Phys. Rev. Lett.* 54(15): 1730.
- Elser, V. 1986. The diffraction pattern of projected structures. *Acta Cryst.* A42: 36-43.
- Elser, V. 1987. The growth of quasicrystals. p. 162-183. En: *Proc. XVth Int. Coll. on group theoretical methods in physics* (Drexel University ed.). World Scientific, Singapore. 460 pp.
- Elser, V. 1988. The growth of icosahedral phase. p. 105-136. En: *Aperiodicity and order*, vol.3. (M.V. Jarič y D. Gratias, eds.). Academic Press, inc., Boston. 223 pp.
- Elser, V., y N.J.A. Sloane. 1987. A highly symmetric four-dimensional quasicrystal. *J. Phys. A: Math. Gen.* 20: 6161-6168.
- Friedel, J. 1967. *Dislocations*. Pergamon press, London. 560 pp.
- Gahler, F. y J. Rhyner. 1986. Equivalence of the generalized grid and projection methods for the construction of quasiperiodic tilings. *J. Phys. A: Math. Gen.* 19: 267-277.

- Janssen, T. 1986. Crystallography of quasi-crystals. Acta Cryst. A42: 261-271.
- Janssen, T. 1988. Aperiodic crystals: a contradictio in terminis?. Phys. Rep. 168(2):55-113.
- Janot, C., M. De Boissieu, J.M. Dubois y J. Pannetier. 1989. Icosahedral crystals: neutron diffraction tells you where the atoms are. J. Phys.: Condens. Matter. 1: 1029-1048.
- Jaric, M.V. 1986. Diffraction from quasicrystals: Geometric structure factor. Phys. Rev. B. 34(7): 4685-4698.
- Kalugin, P.A., A.Y. Kitayev y L.S. Levitov. 1986. 6-Dimensional properties of Al₈₆Mn₁₄ alloy. JETP Lett. 41: 119-121.
- Katz, A. y M. Duneau. 1986. Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry. J. Physique 47: 181-196.
- Katz, A. 1988. Theory of matching rules for the 3-dimensional Penrose tilings. Commun. Math. Phys. 118: 263-288.
- Kleman, M. 1988. Imperfections in quasi-crystals: dislocations. p. 318-326. En: Quasicrystalline materials. (Ch. Janot y J.M. Dubois, eds.). World Scientific, Singapore. 434 pp.
- Kramer, P. y R. Neri. 1984. On periodic and non-periodic space fillings of E^n obtained by projection. Acta Cryst. A40: 550-587.
- Kramer, P. 1985. On the theory of a non periodic quasilattice associated with the icosedral group. Z.Naturf. A43: 775.
- Kramer, P. 1986. Quasilattices in E^3 and their projection from lattices in E^n . J. Physique colloque 47: C3 75-83.
- Kramer, P. 1987. Continuous rotation from cubic to icosahedral order. Acta Cryst. A43: 486-489.

- Kramer, P. 1988. Space-group theory for a non-periodic icosahedral quasilattice. *J. Math. Phys.* 29(2): 516-524.
- Kramer, P. 1988 II. Group theory of icosahedral quasicrystals. p.81-154. En: Aperiodicity and order, vol.2. (M.V. Jarič y D. Gratias, eds.). Academic Press, inc., Boston. 226 pp.
- Kramer, P. y D. Zeidler. 1989. Structure factors for icosahedral quasicrystals. *Acta Cryst.* A45: 524-533.
- Levine, D. y P.J. Steinhardt. 1984. Quasicrystals: A new class of ordered structures. *Phys. Rev. Lett.* 53(26): 2477-2480.
- Levine, D., T.C. Lubensky, S. Ostlund, S. Ramaswamy, P.J. Steinhardt y J. Toner. 1985. Elasticity and dislocations in pentagonal and icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.* 54: 1520-1523.
- Levine, D. y P.J. Steinhardt, J. 1986. Quasicrystals: I. Definition and structure. *Phys. Rev. B.* 34(2): 596-616.
- Levitov, L.S. y J. Rhyner. 1988. Crystallography of quasicrystals; application to icosahedral symmetry. *J. Physique* 49: 1835-1849.
- Lubensky, T.C., J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt, P.A. Bancel y P.A. Heiney. 1986. Distortion and peak broadening in quasicrystal diffraction patterns. *Phys. Rev. Lett.* 57(12): 1440-1443.
- Mackay, A. 1977. The generalized inverse and inverse structure. *Acta Cryst.* A33: 212-215.
- Mackay, A. 1981. De Nive Quinquangula: On the pentagonal snowflake. *Sov. Phys. Crystallogr.* 26(5): 517-522.
- Mackay, A. 1982. Crystallography and the Penrose pattern. *Physica A.* 114: 609-613.
- Mackay, A. 1987. A bibliography of quasicrystals. *Int. J. Rapid Solidification.* 3-4: S1-S41.

- Marcus, M.A. y V. Elser. 1986. T₂-AlLiCu: A stable icosahedral phase?. *Phil. Mag. B.* 54: L101-L104.
- Oguey, C., M. Duneau y A. Katz. 1988. A geometrical approach of quasiperiodic tilings. *Commun. Math. Phys.* 118: 99-118.
- Pavlovitch, A. y M. Kléman. 1987. Generalized 2D Penrose tilings: structural properties. *J. Phys. A: Math. Gen.* 20: 687-702.
- Penrose, R. 1974. The rôle of aesthetics in pure and applied mathematical research. *Inst. of Math. and its Appl.* July: 266-271.
- Ranganathan, S. 1966. On the geometry of coincidence-site lattices *Acta Cryst.* 21: 197-199.
- Reif, F. 1968. *Fundamentos de física estadística y térmica.* Ed. McGraw-Hill, Madrid. 645 pp.
- Rokhsar, D.S., N. Mermin y D.C. Wright. 1987. Rudimentary quasicrystallography: The icosahedral and decagonal reciprocal lattices. *Phys. Rev. B.* 35(11): 5487-5495.
- Romeu, D. 1988. Atomic structure of the decahedral phase. *Int. Jou. Mod. Phys. B.* 2(1): 77-85.
- Romeu, D. 1988 II. Atomic structure of the icosahedral phase. *Int. Jou. Mod. Phys. B.* 2(2):265-272.
- Romeu, D. 1989. Quasicrystals, crystals and multiply twinned particles. A unified growth model. *Acta Met.* En prensa.
- Shechtman, D., I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn. 1984. Metallic phase with long-range order and no translational symmetry. *Phys. Rev. B.* 53(20): 1951-1953.
- Shen, Y., S.J. Poon, W. Dmowsky, T. Egami y G.J. Shiflet. 1987. Structure of Al-Li-Cu icosahedral crystals and Penrose tiling. *Phys. Rev. Lett.* 58: 1440.

ANEXO A

Demostración del Teorema 2 (sección IV.1)

El Teorema 2 propuesto en la Sección IV.1 constituye una generalización del teorema de Hadwiger a redes ortorrómbicas. Con objeto de hacer más evidente el resultado, la demostración que daremos en esta parte, requerirá de otros dos teoremas auxiliares que procedemos a enunciar.

Como a lo largo de este trabajo, consideraremos que el espacio \mathbb{R}^N se descompone como $\mathbb{R}^N = E'' \oplus E^\perp$, con $\dim(E'') = n$ ($n < N$) y $\dim(E^\perp) = N - n$. Consideraremos también que $\{e_i\}_{i=1}^N$ es una base ortorrómbica de \mathbb{R}^N con $\lambda_i = \|e_i\|$, ($i=1, \dots, N$).

Teorema A1. Si $\{e_i\}_{i=1}^N$ es una base ortorrómbica (esto es, si $e_i \cdot e_j = \lambda_i \lambda_j \delta_{ij}$), entonces $\{a_i/\lambda_i\}$ es una estrella eutáctica normalizada.

Demostración: Sea $\{e_i^*\}_{i=1}^N$ la base recíproca a $\{e_i\}_{i=1}^N$, donde $e_i^* = e_i/\lambda_i^2$, para $i=1, \dots, N$, puesto que para ese caso se tiene:

$$e_i \cdot e_j^* = (e_i \cdot e_j) / \lambda_i^2 = (\lambda_i \lambda_j \delta_{ij}) / \lambda_i^2 = \delta_{ij}$$

Así, para cualquier $P \in \mathbb{R}^N$ podemos escribir:

$$P = \sum_{i=1}^N (P \cdot e_i^*) e_i = \sum_{i=1}^N (P \cdot e_i) / \lambda_i^2 e_i$$

de manera que si tenemos que $P \in E''$, puesto que $P \cdot e_i = P \cdot a_i$, se tiene:

$$P = \sum_{i=1}^N \frac{P \cdot a_i}{\lambda_i} \frac{a_i}{\lambda_i} \quad (A.1)$$

de donde se sigue inmediatamente, por el Teorema de Hadwiger (Teorema 1

de la Sección IV.1), que $\{a_i/\lambda_i\}$ es eutáctica normalizada.

Teorema A2. Sea $\{c_i\}_{i=1}^N$ un subconjunto de E^n . Si existen N números reales positivos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$, tales que $\{c_i/\lambda_i\}$ forman una estrella eutáctica normalizada, entonces existe una base $\{e'_i\}_{i=1}^N$ de \mathbb{R}^N que es ortorrómbica y puede escribirse como $e'_i = c_i + d_i$, con $d_i \in \mathbb{R}^n$.

Demostración: Puesto que $\{c_i/\lambda_i\}$ es eutáctica, existe una base ortonormal $\{\varepsilon_i\}_{i=1}^N$ de \mathbb{R}^N que puede descomponerse (lo que es equivalente a proyectar sobre E^n y E^\perp) como

$$\varepsilon_i = c_i/\lambda_i + f_i \quad (\text{A.2})$$

para alguna $f_i \in E^\perp$.

Consideremos ahora el conjunto $\{e'_i\}_{i=1}^N$, donde $e'_i = \lambda_i \varepsilon_i$. Es claro que $e'_i \cdot e'_j = \lambda_i \lambda_j \delta_{ij}$, de manera que $\{e'_i\}_{i=1}^N$ es ortorrómbica.

La descomposición de e'_i se sigue inmediatamente si sustituimos $e'_i = \lambda_i \varepsilon_i$ en A.2: $e'_i = c_i + \lambda_i f_i$. Con lo que concluye la demostración.

De los teoremas anteriores podemos inferir que si tenemos una estrella $\{c_i\}_{i=1}^N$ y si existen $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$, reales positivos, tales que $\{c_i/\lambda_i\}$ sea eutáctica normalizada, esto es (por el teorema A1), tales que se cumpla A.1, entonces (por el teorema A2) existe una base ortorrómbica $\{e'_i\}_{i=1}^N$ que proyecta en la estrella $\{c_i\}_{i=1}^N$. De aquí que el Teorema 2 de la Sección IV.1 es realmente un corolario del Teorema A2.