

18
07



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**GENERACION DE ESTRUCTURAS CUASICRISTALINAS
POR EL METODO DUAL GENERALIZADO**

TESIS PROFESIONAL

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A

GERARDO GARCIA NAUMIS

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

MEXICO, D. F.

1990



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

| | |
|---|----|
| Introducción..... | 1 |
| CAPITULO I | |
| 1.1 El problema de los cuasicristales..... | 3 |
| 1.2 Modelos propuestos para explicar los cuasicristales..... | 9 |
| 1.2.1 Modelo de maclas..... | 9 |
| 1.2.2 Modelos basados en estructuras matemáticas cuasiperiódicas..... | 10 |
| 1.2.3 Vidrio icosaedroal..... | 17 |
| 1.2.4 Modelo recursivo (R)..... | 18 |
| CAPITULO II | |
| 2.1 Metodos matemáticos para generar estructuras cuasiperiódicas.. | 23 |
| 2.2 Método de corte y proyección..... | 24 |
| 2.3 Método dual generalizado..... | 31 |
| (A) El esqueleto de un mosaico y la construcción de N-rejillas.. | 31 |
| (B) La transformación dual..... | 40 |
| CAPITULO III | |
| 3.1 Motivación del trabajo..... | 62 |
| 3.2 Algoritmos de cómputo para implementar el MDG..... | 64 |
| 3.3 Parámetros del MDG..... | 71 |
| 3.3.1 Elección de las estrellas vectoriales..... | 72 |
| 3.4 Resultados..... | 75 |
| 3.4.1 Mosaicos bidimensionales..... | 75 |
| 3.4.2 Mosaicos tridimensionales y la estrella icosaedroal..... | 76 |
| 3.4.3 Estudio de la fase T..... | 78 |
| CAPITULO IV | |
| 4.1 Discusión..... | 85 |
| 4.2 Conclusiones..... | 92 |
| Bibliografía..... | 94 |

Introducción

El descubrimiento de los cuasicristales, hecho en 1985 [1], ha sido de gran interés, porque mostró una forma de agregación de la materia condensada intermedia entre los sólidos cristalinos y amorfos.

El primer cuasicristal obtenido fué una aleación de Aluminio con Manganeso; a esta nueva fase se le llamó *icosaedra*l (I). Posteriormente se descubrieron otras dos fases cuasicristalinas: la decagonal (T) y la dodecagonal. Aunque la fase I ha sido profusamente estudiada, las otras dos, por ser más recientes, no lo han sido tanto. Así pues, el objetivo de esta tesis es estudiar algunos modelos estructurales de la fase T, generados por un método matemático desarrollado originalmente para la fase I.

En líneas muy generales, se construyeron estructuras tridimensionales mediante el método *dual generalizado* (MDG). Para ello se consideraron diversos poliedros (llamados *estrellas de vectores*), los cuales dan lugar, al aplicarles el MDG, a diversas estructuras. Las estructuras resultantes fueron estudiadas para comprobar si contenían los elementos de simetría que se han determinado experimentalmente para la fase T. También se obtuvieron los patrones de difracción de los resultados, para compararlos con el experimento.

Para aplicar el método *dual generalizado* se desarrollaron algoritmos de cómputo así como varios programas de computadora escritos en Pascal.

La tesis está dividida en cuatro capítulos; en el primero se expone el problema de los cuasicristales; partiendo de la cristalografía clásica se llega a por qué los cuasicristales no pueden ser explicados dentro de ésta. Después se presenta una revisión de los modelos propuestos para explicar los cuasicristales.

El capítulo II expone dos métodos matemáticos para generar estructuras cuasiperiódicas: corte y proyección y MDG. Al último se le estudia con gran detalle porque ha sido el escogido para usarse en la presente tesis.

En el capítulo III se presentan los poliedros generadores que fueron usados y los parámetros escogidos para el MDG. Aquí se incluye un resumen de los algoritmos que sirvieron para hacer los programas de cómputo (ejecutados en una computadora DIGITAL VAX 11/780). En este capítulo se incluyen los resultados obtenidos.

Al final, en el capítulo IV, se discuten los resultados y se dan las conclusiones del trabajo realizado.

CAPITULO I

§ 1.1 El problema de los cuasicristales

La materia condensada, caracterizada por la fuerte unión entre sus átomos, moléculas e iones que la constituyen, ha sido tradicionalmente clasificada en dos clases atendiendo al grado de ordenamiento de su estructura interna. Estas clases de estructuras son la cristalina y la amorfa.

En las estructuras cristalinas (llamadas cristales), las partículas estructurales se ordenan en el espacio de una manera regular, de modo que es posible obtener la totalidad del sólido aplicando una repetición periódica, translacional y tridimensional de un módulo mínimo de materia (formado por átomos, iones o moléculas). Este hecho constituye la propiedad más sobresaliente de los cristales: su orden translacional periódico de largo alcance.

Los materiales de la otra clase, a diferencia de los cristales, no presentan orden de largo alcance; sólo tienen orden de corto alcance (del orden de Angstroms). A estos materiales, llamados amorfos, se les considera muchas veces como líquidos congelados cuya dureza se debe a una viscosidad muy alta [2]. La mayoría de los materiales son amorfos, como por ejemplo el vidrio y algunos plásticos.

Gracias al orden translacional de los cristales es posible dar una clasificación global de todos los tipos de estructuras cristalinas que se puedan dar en la naturaleza, lo cual no sucede con los materiales amorfos. Para llegar a esta clasificación, es necesario realizar una abstracción matemática de la estructura del cristal. Esta abstracción, llamada red puntual, es obtenida al notar que un punto arbitrario del módulo mínimo material se puede comparar con un punto equivalente en cualesquiera de los otros módulos obtenidos por translaciones. Los puntos obtenidos de este modo constituyen la abstracción deseada que facilita la tarea de estudiar el cristal.

Al igual que en éste, la red puntual puede obtenerse por una repetición periódica, translacional y tridimensional de una celda llamada *unitaria*. La celda unitaria puede escogerse de varias maneras pero sea cual sea la elección deberá poder reproducir la red puntual.

Los puntos de red en la celda unitaria conforman un poliedro aunque resulta conveniente, y siempre es posible hacerlo [3], escoger un paralelepípedo que sirva como envolvente para dichos puntos. El paralelepípedo necesariamente contendrá puntos de red en sus vértices y algunas veces en sus caras, centro o bases. Atendiendo a las combinaciones que se pueden hacer entre las longitudes de las aristas del paralelepípedo y los ángulos entre ellos, se obtienen siete formas fundamentales que resultan ser compatibles con la simetría translacional de la red puntual.

A su vez, considerando que los puntos de red, además de los vértices, pueden ocupar las caras, bases y el centro del paralelepípedo, las siete formas cristallinas básicas dan lugar a catorce celdas unitarias posibles, las cuales son los módulos básicos para otras tantas redes puntuales llamadas "redes de Bravais" en honor a Auguste Bravais, quien las dedujo en 1848 [3].

Así, la red puntual de cualquier cristal pertenece a alguna de las catorce redes fundamentales.

Entre las posibles elecciones de celdas unitarias hay una que posee un volumen mínimo comparada con las otras y que se puede asociar con un sólo punto de red; a esta celda se le llama *primitiva* [3]. La celda primitiva define con sus aristas tres vectores, a_1 , a_2 , a_3 (llamados vectores primitivos) los que permiten obtener la totalidad de los puntos de red como una combinación lineal de ellos [3] :

$$n = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3, \text{ donde: } n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \quad (1.1).$$

De aquí se sigue otra propiedad fundamental de un cristal: orden

orientacional de largo alcance a lo largo de los vectores a_1 , a_2 y a_3 .

Debido al orden translacional de la red puntual, surgen simetrías rotacionales, especulares y centros de inversión, es decir, la red es congruente consigo misma al aplicarle un giro, una reflexión o una inversión. Cada una de éstas operaciones de simetría define un conjunto de puntos que tienen la propiedad de que no se ~~mueven~~ mueven bajo la aplicación de la operación. A dicho conjunto se le llama *elemento de simetría* y puede ser una línea, un plano o un punto.

El conjunto de operaciones de simetría que dejan invariante a la red y cuyo elemento de simetría contiene un punto de ésta, forman una estructura matemática llamada grupo si se considera como operación binaria entre los elementos del conjunto la composición de operaciones de simetría.

A dichos grupos se les llama puntuales. Las catorce redes de Bravais dan lugar a treinta y dos grupos puntuales cristalográficos, los cuales resultan ser muy útiles para estudiar la morfología macroscópica de un cristal [4]. Dentro de estos grupos sólo están presentes simetrías rotacionales binarias, ternarias, cuaternarias o senarias (180° , 120° , 90° y 60° respectivamente) [5]. No pueden existir simetrías rotacionales de orden mayor que seis ni tampoco se permite la simetría quíntica (72°) ya que resultan ser incompatibles con el orden translacional [6]. En el caso de la simetría quíntica, esta incompatibilidad se traduce en el hecho de que es imposible cubrir completamente sin dejar huecos, una superficie plana con pentágonos regulares (los cuales se consideran los representantes de la simetría quíntica) porque al juntarlos por sus lados siempre quedan huecos en forma de rombos puntilagudos [7].

Las simetrías de los cristales dan lugar a que sus patrones de difracción de rayos X, electrones o neutrones sean muy distintos a los de los amorfos. Mientras que el patrón de difracción de un cristal consiste en un conjunto de picos delgados (llamados picos de Bragg), el de un amorfo está formado por anillos difusos [8].

El patrón de difracción discreto observado de un cristal se deduce de la periodicidad del mismo. En efecto, cualquier función escalar de la red (como potencial dispersor, densidad electrónica, etc.), $\delta(\mathbf{r})$, resulta ser periódica y, por consiguiente puede ser expandida en una triple serie de Fourier utilizando un conjunto de vectores recíprocos $\{g_q\}$ [2]:

$$\delta(\mathbf{r}) = \sum_h \sum_k \sum_l \delta_{hkl}^* \exp(i \langle g_q, \mathbf{r} \rangle) \quad (1.2)$$

donde: $g_q = h\mathbf{e}_1^* + k\mathbf{e}_2^* + l\mathbf{e}_3^*$; (donde $h, k, l \in \mathbb{Z}$), cumpliéndose la siguiente relación entre los vectores \mathbf{e}_r^* y \mathbf{a}_j : $\langle \mathbf{e}_r^*, \mathbf{a}_j \rangle = 2\pi \delta_{rj}$. Aquí δ_{hkl}^* es una amplitud compleja asociada con el vector recíproco g_q .

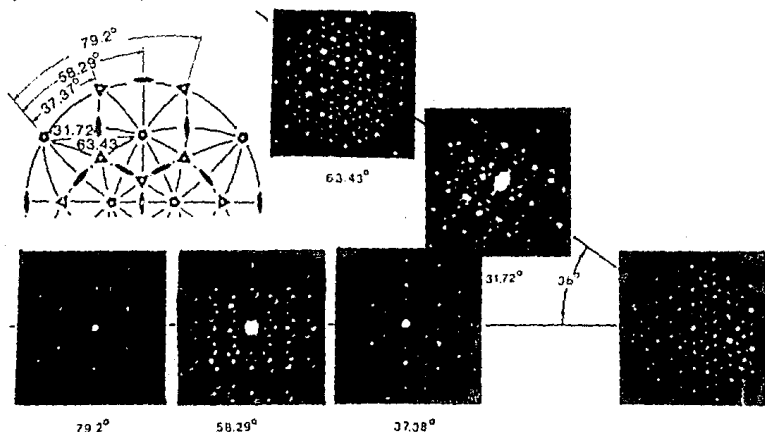
Esta expansión indica que la transformada de Fourier de $\delta(\mathbf{r})$ consiste en un conjunto de picos discretos (es decir, funciones delta de Dirac); y puesto que el patrón de difracción debido a un potencial dispersor es proporcional al cuadrado de la norma de la transformada de Fourier [9], resulta que el patrón también consistirá en un conjunto de picos discretos.

De la relación entre los vectores recíprocos y los vectores primitivos que aparece en (1.2) se observa que ambos conjuntos tienen las mismas simetrías por lo que los patrones de difracción deben de tener la simetría de alguno de los treinta y dos grupos puntuales [2]. De este modo, resulta claro que no deberían existir sólidos cuyo patrón de difracción consistiera en picos de Bragg distribuidos de acuerdo a una simetría quíntupla.

Sin embargo, en 1984, Shechtman, Bletch, Gratias y Cahn [10] descubrieron experimentalmente una aleación de $\text{Al}_{60}\text{Mn}_{20}$ cuyo patrón de difracción de electrones estaba formado por picos de Bragg con ejes de simetría quíntupla.

Analizando las simetrías del patrón obtenido, Shechtman et al. encontraron que éstas eran las mismas que las de un icosaedro, el cual contiene seis ejes de simetría cinco (grupo puntual $\overline{m}\overline{3}\overline{5}$). Para ello basta

comparar los patrones de difracción obtenidos tomados a distintos ángulos siguiendo las simetrías de un icosaedro, con la proyección esterográfica polar del grupo puntual icosaedral (fig. 1).



(fig 1.1. Comparación entre el grupo puntual icosaedral y los patrones de difracción de electrones obtenidos por Shechtman et al. a diversos ángulos partiendo de un eje de simetría quinario {10}).

Por esta razón, la fase presentada por la aleación $Al_{60}Mn_{20}$ se le llamó fase icosaedral (fase I) comprobándose con diversos experimentos que era una fase metaestable [10]. Para obtenerla, se enfrió de manera ultrarrápida (un millón de grados Kelvin por segundo) la aleación fundida lo cual impidió que esta tuviera tiempo para cristalizarse normalmente.

El descubrimiento de la fase I resulta muy importante porque aunque la simetría icosaedral está prohibida para cristales (por tener ejes de simetría cinco), su patrón de difracción está formado por picos de Bragg, lo que sería indicativo de una nueva clase de estructura intermedia entre los cristales y los amorfos.

En efecto, según Shechtman et al., la fase I presenta orden

orientacional de largo alcance pero carece de orden translacional periódico [10].

Desde 1984 han sido encontradas otras aleaciones que presentan simetría icosaedrales como $FeTi_2$, $NiTi_2$, Al_6Li_3Cu [11]. También se han descubierto dos nuevas fases, la decagonal ($Al_{80}Mn_{20}$, $Al_{80}Fe$) [12] y la dodecagonal ($Ni-(70.6 \text{ at. } \% Cr)$) [13] que tienen simetrías rotacionales cristalográficas prohibidas.

A todas estas nuevas estructuras que no son cristalinas pero que tienen patrones de difracción con picos discretos, se les ha dado el nombre de *cuasicristales* (este término fue acuñado originalmente por P. Steindhardt y D. Levine para designar a un tipo específico de redes [14], pero actualmente su uso se ha generalizado).

El establecimiento de la fase I como un nuevo tipo de estructura de la materia ha sido objeto de acalorados debates; aún el mismo D. Shechtman fué escéptico ante sus resultados y durante dos años buscó posibles causas accidentales para explicar los mismos [10]. Entre las posibles causas, la más plausible coincide con la explicación propuesta por varias personas, entre las que destaca Linus Pauling. Esta consiste en buscar el origen de la simetría cinco en una mezcla homogénea de microcristales orientados de acuerdo a una simetría quíntica. Este es un caso particular de lo que en cristalografía clásica se conoce como *gemelación*. La gemelación es la formación de un agregado atómico (llamado "macla") por cristales individuales que crecen juntos alrededor de un plano de simetría. Esto permite que el agregado tenga cualquier simetría aunque los cristales que lo forman no la tengan; un caso muy conocido es el de la Pirita; aunque sus cristales tengan simetría cúbica, es frecuente que formen maclas con forma de dodecaedros [5].

Shechtman et al. realizaron diversos estudios utilizando técnicas muy finas de microscopía electrónica (las cuales serán tratadas mas extensamente en la sección 1.2) no pudiéndose detectar las posibles maclas [10]. Posteriormente varios grupos han confirmado la ausencia de éstas

[15], aceptándose generalmente que la fase I es un tipo nuevo de estructura.

§ 1.2 Modelos propuestos para explicar los cuasicristales

Desde el descubrimiento de Shechtman se han formulado varios modelos para explicar los cuasicristales y los resultados experimentales asociados a ellos. Estos modelos son: gemelación múltiple, modelos basados en estructuras matemáticas cuasiperiódicas, vidrio icosaedral y recursivo. A continuación se presenta un reseña de los rasgos generales de cada uno de ellos, dándose énfasis en los dos últimos porque son los que están relacionados más directamente con la presente tesis.

§ 1.2.1 Modelo de maclas

Este modelo, como se mencionó en la sección 1.1, explica los cuasicristales en base a una gemelación múltiple de cristales individuales con una simetría cristalográfica permitida. El tamaño de los cristales individuales propuestos da lugar a dos subdivisiones: una es maclas con celdas unitarias del tamaño usual en las fases cristalinas formadas por los mismos elementos ($\approx 40\text{Å}$) y otra con celdas unitarias muy grandes [8].

Linus Pauling ha sido uno de los principales defensores de la gemelación múltiple del primer tipo. El propuso como celda unitaria a un cristal cúbico primitivo de 820 átomos con aristas de longitud 23.36Å [16]. Sin embargo, diversos estudios experimentales no han mostrado las posibles maclas. La clase de estudios que se han llevado a cabo para llegar a esta conclusión son:

-Difracción de electrones con un haz muy convergente (de aproximadamente 15Å de ancho). Los patrones resultaron tener siempre la misma simetría icosaedral [10]. (Si hubiera maclas se esperaría obtener, con esa

resolución , patrones de difracción con simetrías cristalográficas permitidas).

-Imágenes reconstruidas utilizando sólo algunos picos del patrón de difracción(Imágenes de campo oscuro). Si se aplica esta técnica a maclas de cristales, los cristales individuales aparecen muy claramente definidos. La misma técnica aplicada a los cuasicristales no ha revelado la existencia de maclas [8].

-Las imágenes tomadas con microscopio electrónico resultan ser altamente homogéneas hasta en detalles observados con una precisión de Ångstroms [15].

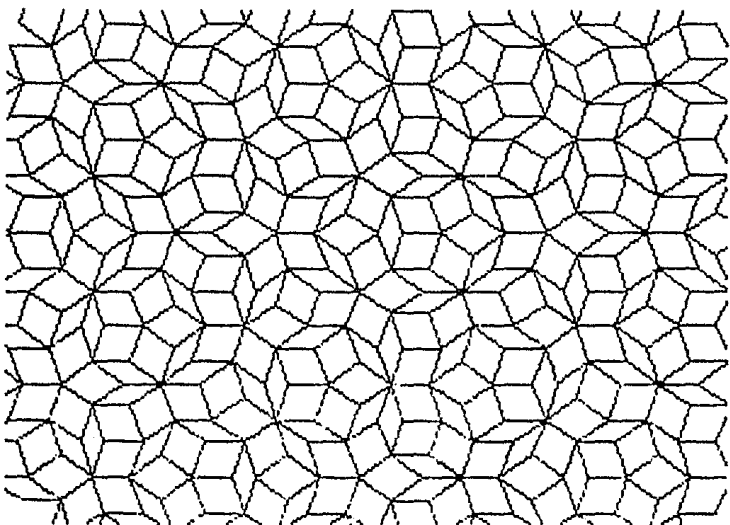
El segundo tipo de maclas estaría formada por celdas unidad muy grandes que puedan contener en su interior agregados atómicos con simetría cinco, tal como sucede en algunos materiales (un ejemplo es el llamado icosaedro de MacKay el cual se presenta en aleaciones de Al y Mn). Aunque este modelo es más compatible con las observaciones experimentales, el tamaño de la celda unidad resultaría demasiado grande($>100 \text{ \AA}$) comparada con el de las celdas unidad presentes en aleaciones del mismo tipo (aprox. 10 \AA) [8].

§ 1.2.2 Modelos basados en estructuras matemáticas cuasiperiódicas

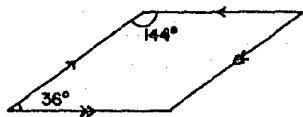
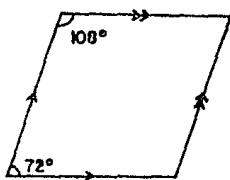
El punto de partida de todos estos modelos de cuasicristales, es un mosaico descubierto en 1974 por el físico matemático inglés R. Penrose.

Penrose encontró cómo tapizar sin dejar huecos un plano de manera aperiódica utilizando dos tamaños distintos de rombos: uno llamado *rombo gordo* y el otro *rombo delgado* [17] (fig 2).

Los rombos gordo y delgado forman al Penrose al unirse por sus lados siguiendo ciertas reglas de acoplamiento (fig. 1.3).



(fig 1.2. Sección de un mosaico de Penrose)



(fig. 1.3 a) rombo gordo y b) rombo flaco. Para formar el mosaico de Penrose, los rombos mostrados se deben unir de modo que las flechas situadas sobre sus lados coincidan)

Los mosaicos de Penrose tienen propiedades notables; una de ellas consiste en que dado un mosaico es posible obtener otro con piezas más pequeñas. Para ello es necesario aplicar al mosaico original una regla de subdivisión llamada de *deflación*.

La regla de deflación indica que un rombo delgado (Rd) se convierte en un rombo delgado (Rd') y uno gordo (Rg') de la siguiente generación : $Rd \rightarrow Rd' + Rg'$. Análogamente, un rombo gordo (Rg) se subdivide en dos gordos (Rg') y uno delgado (Rd'); es decir: $Rg \rightarrow 2Rg' + Rd'$ (fig. 4) [17]..



(fig 1.4 Regla de deflación de a) un rombo gordo y b) uno delgado.)

Usando la regla de deflación también se puede generar un mosaico de Penrose. Para ello es necesario aplicar recursivamente la deflación partiendo de uno de los rombos; este método recursivo permite calcular la proporción entre rombos gordos y flacos que existen en un Penrose. Dicha proporción vale:

$$\#(g/d) = a_{n+1} / a_n$$

donde n es el número de la generación a la cual pertenece el mosaico, cumpliéndose la siguiente relación de recurrencia para las a_n :

$$a_n = a_{n-1} + a_{n-2} \quad (1.3)$$

con valores iniciales $a_0=0$ y $a_1=1$.

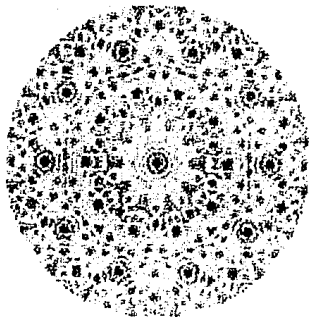
La fórmula de recurrencia (1.3) es muy conocida por el número asombroso de resultados interesantes relacionados con ella [18]. A la sucesión definida por ella se le llama de *Fibonacci* (1175-1250 aproximadamente). Para las primeras generaciones, las proporciones son: 2/1, 5/3, 13/8, 34/21, Esta serie también se llama de *Fibonacci* y converge, para n grandes, a la media dorada: $\tau = 1/2(1+\sqrt{5})$ [17] (la media dorada es conocida desde los griegos por su relevancia en el arte y las matemáticas).

Por lo tanto, para un mosaico de Penrose la proporción entre los dos tipos de rombos converge a la media dorada para un número grande de piezas.

Otra característica notable de estos mosaicos es el hecho de que todos los vértices de los rombos son expresables como combinaciones lineales enteras de cinco vectores que apuntan hacia los vértices de un pentágono (esta aseveración será estudiada más detenidamente en el capítulo 2); es decir, existe orden orientacional quinario.

Muchas de estas curiosas propiedades llevaron a que en 1981 Alan Mackay introdujera a la cristalografía estos mosaicos como un ejemplo de estructura infinita, obtenida por una regla simple, que resulta ser más complicada que las redes planas periódicas [19]. En un artículo posterior [14], Mackay obtuvo el patrón de difracción de un mosaico de Penrose utilizando un difractor óptico. El patrón obtenido mostraba picos de Bragg delgados orientados de acuerdo a direcciones definidas por los vértices de un pentágono.

Los picos de Bragg se encontraban separados sobre cada una de las direcciones a una distancia uno o τ en una secuencia aperiódica (fig. 1.5).



{fig. 1.5 .Patrón de difracción de un mosaico de Penrose}

El hecho de que el patrón de difracción indique picos discretos refleja orden translacional de largo alcance [15] que no resulta obvio al observar el mosaico. ¿Cuál es la clase de orden translacional existente en el Penrose?

La respuesta proviene de la observación hecha por Mackay de que para cada dirección donde haya puntos en el patrón existen dos vectores recíprocos con longitudes relativas incomensuradas (τ es un número incommensurable respecto a la unidad), por lo que en una dirección dada del patrón, una función escalar asociada a esta se expresa como una serie de Fourier utilizando dos vectores recíprocos de normas incommensurables:

$$f(x) = \sum_{m,n} A_{m,n} \exp(2\pi i(mx + n\tau x)) \quad (1.4)$$

Esta función es un caso particular de lo que se conoce como *funciones cuasiperiódicas*, las cuales no son periódicas en el espacio real aunque son expresables como una suma finita de funciones del tipo: $\exp(2\pi i(n_1 u_1 + n_2 u_2 + \dots + n_N u_N)x)$, ($n_i \in \mathbb{Z}$); para N fijo, siendo las u_i racionalmente independientes [11].

En general, una función cuasiperiódica $f(x)$ puede ser escrita como

[11] :

$$f(x) = \sum_{n_1, \dots, n_N} f^*(n_1, n_2, \dots, n_N) \exp(2\pi i(n_1 v_1 + \dots + n_N v_N)x). \quad (1.5)$$

La función $f(x)$ así obtenida no será periódica (exceptuando cuando las v_i son racionalmente dependientes o el caso $N=1$); sin embargo, es posible obtener a $f(x)$ mediante una función periódica g de N variables independientes:

$$g(x_1, \dots, x_N) = \sum_{n_1, \dots, n_N} f(n_1, \dots, n_N) \exp(2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2 + \dots + n_N x_N)), \quad (1.6)$$

donde las x_i de la función (1.6) se relacionan con las v_i de (1.5) por la siguiente igualdad: $x_i = v_i x$.

En el caso de la función (1.4) se tendrá:

$$g(x, y) = \sum_{m, n} A_{m, n} \exp(2\pi i(mx + ny))$$

donde $g(x, y)$ resulta ser una función escalar periódica en \mathbb{R}^2 .

La misma idea es aplicable al caso de funciones escalares cuasiperiódicas de un espacio tridimensional ($f(x, y, z)$). En este caso, se tendrá un conjunto de N vectores base en el espacio recíproco, $\{q_n\}$, que permiten desarrollar a $f(x, y, z)$ como una serie de Fourier con vectores recíprocos q generados por combinaciones lineales de la base:

$$f(x, y, z) = \sum f^*(n_1, n_2, \dots, n_N) \exp(i \langle q, r \rangle); \quad (1.7)$$

donde: $q = \sum_{i=1}^N n_i q_i$, y $n_i \in \mathbb{Z}$.

La función definida de este modo es cuasiperiódica si N es mayor que la dimensión espacial, (d) . Si N es igual a d , la ecuación (1.7) se

reduce a la (1.1), correspondiente al caso de un cristal periódico. Pero sea cual sea el valor de N , el espectro de la función $f(x,y,z)$ estará formado por deltas de Dirac centradas en los puntos q .

De aquí se sigue que el orden translacional de los mosaicos de Penrose es cuasiperiódico, razón por la cual P. Steidhardt les ha llamado *estructuras cuasiperiódicas*.

Desde el descubrimiento de los cuasicristales, los patrones de Penrose han servido para despojar a aquéllos de su carácter paradójico; en ambos casos las estructuras carecen de orden translacional periódico aunque tienen un orden orientacional de largo alcance y patrones de difracción constituidos por picos delgados de Bragg.

Estas coincidencias han llevado a proponer modelos de cuasicristales basados en mosaicos de Penrose tridimensionales, lo que ha motivado un estudio exhaustivo de las estructuras matemáticas cuasiperiódicas. Se han encontrado varios métodos para obtenerlas partiendo de un enfoque distinto al de los métodos expuestos en esta sección; de hecho se ha visto que los mosaicos de Penrose son sólo un caso particular de una infinidad de estructuras cuasiperiódicas. Los métodos existentes en la actualidad provienen del método de multimallas propuesto por el matemático DeBruijn; derivándose de éste los métodos de corte y proyección y del dual generalizado.

Aunque los modelos basados en el mosaico de Penrose han tenido una gran aceptación, la correspondencia entre ellos y los resultados experimentales todavía no es satisfactoria; mientras que los patrones de difracción predichos por la teoría son picos de Bragg con una anchura dada por una función delta de Dirac, los patrones observados tienen un ancho finito (0.01 \AA^{-1}). Para explicar esta diferencia, se ha propuesto que el ancho finito de los picos sea consecuencia de defectos estructurales producidos durante el crecimiento del cuasicristal [8]. En algunas direcciones de los patrones, las diferencias entre el modelo de estructura cuasiperiódica y el material real son muy notorias. Parte del

problema se debe a la incertidumbre que existe acerca de cómo se deben colocar los átomos en las celdas de la estructura para reproducir correctamente los resultados experimentales (es decir, el problema es cómo "decorar" las celdas). En todos los casos, la estructura decorada deberá ser estable.

§ 1.2.3 Vidrio icosaedral

El modelo de vidrio icosaedral propone para los cuasicristales una estructura amorfa en el sentido de que no hay orden translacional de largo alcance, aunque existe un orden químico de corto alcance [20] que da lugar a agregados atómicos empacados densamente de acuerdo a una simetría icosaedral local [20]. Para generar uno de estos vidrios icosaedrales, se unen aleatoriamente formas con simetría icosaedral (no necesariamente icosaedros) de acuerdo a ciertas reglas que permiten preservar el orden orientacional.

Las reglas varían pero generalmente indican unir las formas vértice con vértice, cara a cara, arista a arista, etc. Dado que la estructura obtenida deja grandes huecos en el espacio, el modelo propone que sea llenado por un arreglo amorfo; de ahí el nombre de vidrios icosaedrales

Los patrones de difracción calculados de vidrios icosaedrales también consisten en picos de Bragg pero con un ancho finito, tal como se observa experimentalmente, motivo por el cual ha resultado atractivo el modelo. Sin embargo, el ancho predicho por las simulaciones difiere notablemente con el observado [21]; por ello las reglas de unión se han ido complicando. Otro problema del modelo es la dificultad para explicar el mecanismo que permita alinearse a las formas a lo largo de grandes distancias.

A pesar de ello, el modelo de vidrio icosaedral da argumentos físicos para explicar por qué resulta favorable energéticamente el crecimiento alrededor de semillas icosaedrales dentro de una interfase líquido-sólido[8]. Uno de dichos argumentos hace notar que un icosaedro

se puede formar con diez tetraedros ligeramente distorsionados [7] , los cuales son formas muy eficientes de empaquetado en tres dimensiones; de este modo resulta que el icosaedro es también una forma muy eficiente de empaquetamiento y de ahí su importancia como semilla en una interfase sólido-líquido que avanza rápidamente. Un argumento análogo aplicado al caso de dos dimensiones permite concluir que los hexágonos son formas favorables para el crecimiento por estar formados con seis triángulos equiláteros los cuales son las figuras más eficientes de empaquetado en dos dimensiones.

§ 1.2.4 Modelo recursivo (R)

El modelo R surgió a partir del estudio de las fases cuasicristalinas icosaedral y decagonal desde un punto de vista de nucleación y crecimiento de la materia a diferencia de los modelos expuestos en las secciones precedentes, los cuales le dieron al problema un enfoque estructural. Dicho modelo de nucleación y crecimiento se basa en el *crecimiento decaedral* de cierta clase de agregados atómicos que sirven como semillas.

Este modo de tratar el problema permite obtener directamente la posición de los átomos y por ende varias propiedades físicas del sistema como : funciones de distribución radial, imágenes de microscopio ,frustración, concentración de impurezas, etc. Además, tiene la ventaja de mostrar que los cuasicristales se forman de acuerdo a principios físicos usuales [22].

El problema principal del método de crecimiento decaedral radica en que los agregados, generados por simulaciones en computadora, sólo pueden crecerse hasta cierto tamaño ya que el tiempo requerido de cómputo no permite seguir creciéndolos [22].

Por ello, no se puede probar que siguiendo las reglas del crecimiento decaedral se pueda llenar el espacio, tal como requiere de un modo muy

general cualquier modelo de cuasicristal. Para soslayar esta dificultad, fué necesario dar una generalización recursiva del método de crecimiento decaedra. El modelo que resultó es más geométrico, pero cada regla tiene su justificación en los principios físicos del crecimiento decaedra [22].

El crecimiento decaedra ocurre cuando los átomos que se agregan a un sólido que sirve como semilla lo hacen de manera que completan decaedros interpenetrados. Este proceso es favorable energéticamente por la misma razón dada por el modelo de vidrio icosaedra; el decaedro se forma con cinco tetraedros los cuales son formas muy eficientes de empaquetamiento, de modo que cuando se completa un decaedro se completan a la vez varios tetraedros (es importante señalar que un icosaedro está formado por dos decaedros interpenetrados). Experimentalmente se ha confirmado la aseveración anterior; las partículas de 13, 19, 23, 26, 29, ... átomos, llamadas números mágicos, y que se forman con decaedros, resultan más estables que otras en la condensación de gases raros [22].

Si se extrapola esta forma de crecimiento al proceso de solidificación rápida de metales, se pueden producir agregados atómicos de tamaño cada vez mayor partiendo de una semilla determinada. La regla que permite crecer al agregado completando decaedros consiste en considerar cada par de átomos que son primeros vecinos como un eje de simetría cinco de un decaedro incompleto. El decaedro se completa agregándole átomos y dado que la figura resultante será en general irregular, éstos deberán ser puestos en su lugar mediante una relajación de Lennard-Jones [22].

La elección de la semilla para las fases I y T son los números mágicos de 13 y 19 átomos porque tienen las simetrías de las fases I y T respectivamente; el hecho de que sean números mágicos asegura su existencia en gran número en la interfase de solidificación. Aplicando a estas semillas el crecimiento decaedra, los agregados resultantes van creciendo capa por capa, sin embargo llega un momento en que la frustración no permite seguir creciendo el agregado. Entonces, para continuar el crecimiento se requiere la introducción de otra especie atómica más pequeña (entre 5 y 10 % más pequeña que con la cual se empezó) [22]. Esta

otra especie rellena los huecos de la estructura y otra vez el agregado puede seguir creciendo con los átomos grandes. Eventualmente la frustración tendrá que ser vuelta a reducir con la especie atómica pequeña; este proceso constituye un ciclo llamado de frustración [22].

Aplicando estas ideas ha sido posible obtener un modelo estructural de las fases I y T [23], [24], que reproduce las imágenes de alta resolución tomadas con microscopio, patrones de difracción de electrones y rayos X. El número de átomos en los agregados en cuestión es del orden de cientos.

Para garantizar que se puede llenar el espacio es necesario seguir creciendo los agregados con un método más geométrico. Este método más geométrico se basa en que el llamado *agregado básico*, el cual es el primer agregado que se obtiene al crecer la semilla y en el cual se rellenaron por primera vez los huecos, reproduce las imágenes del microscopio electrónico de un motivo que se presenta en las imágenes obtenidas experimentalmente [22].

Las imágenes reales están formadas por rotaciones e interpenetraciones de este motivo (algo análogo sucede con los mosaicos de Penrose); lo cual lleva a pensar que si el agregado básico se traslada a ciertos puntos de él mismo y así sucesivamente, será posible reproducir la imagen. Es decir, se forma un agregado por la adición iterativa de un agregado básico en ciertos puntos del mismo. En esta translación, habrá un gran número de coincidencias entre los átomos del agregado original y el trasladado; los átomos del agregado trasladado que se encuentren a una distancia menor que cierta distancia prefijada deberán descartarse. Si se relaja con un potencial de Lenard-Jones, el agregado conserva la simetría icosaédrica [22].

Los puntos del agregado básico que sirven como nuevos orígenes para llevar a cabo la iteración se les llama punto "O". La propiedad que distingue a los puntos "O" de los otros átomos es que constituyen centros de icosaedros ligeramente distorsionados.

Geométricamente, los puntos O se caracterizan por ser obtenibles como una combinación lineal con coeficientes enteros de vectores que apuntan hacia los vértices de un icosaedro (al mencionado conjunto de vectores se le llama "estrella icosaedral"). El conjunto de puntos O forma una subestructura que no necesariamente es cuasiperiódica.

Entendiendo así la subred formada por los puntos O, se puede usar el crecimiento decaedral como un método de decorar redes.

La variedad de estructura generadas por el modelo recursivo es grande porque la elección del agregado básico no es única y además existen varias elecciones de los puntos O en cada etapa del crecimiento. De hecho el modelo R genera estructuras cristalinas, partículas múltiplemente gemeladas y cuasicristales, lo cual le da una gran generalidad como modelo de crecimiento [22].

Para generar cuasicristales usando el modelo R se necesita utilizar más de una estrella icosaedral. En particular, para un cuasicristal icosaedral se necesitan dos subfamilias de vectores del agregado atómico básico (se considera que cada átomo define con su posición un radiovector al origen). Las subfamilias son:

$$a) \sum_{i=1}^6 n_i q_i \quad ; \quad n_i = \pm 0, 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

$$b) \frac{2}{3} \sum_{i=1}^6 n_i q_i \quad ; \quad n_i = \pm 0, 1, 2, \dots \quad (1.9)$$

donde los q_i son vectores de una estrella icosaedral. Una subfamilia de (1.8) define los puntos O de la estructura; a saber:

$$c) \sum_{i=1}^6 n_i q_i; \quad n_i = \pm 0, 2, 4, \quad (1.10)$$

La utilización de estas familias no garantiza la formación de una

estructura cuasiperiódica; todavía se requiere que el conjunto de puntos obtenidos por (1.10) sea una estructura matemática cuasiperiódica [22]. Esto impide que se puedan dar todas las combinaciones de las n_i . Para encontrar las combinaciones permitidas, hay que aplicar alguno de los métodos mencionados en la sección 1.2.2, tales como corte y proyección o dual generalizado. Parte del objetivo de esta tesis es estudiar los posibles tipos de estrellas (es decir, los vectores q_i) y parámetros del método del dual que den lugar a una subestructura cuasiperiódica de puntos O con la simetría requerida para la fase T .

Por último, el modelo recursivo sugiere la posibilidad de la existencia de nuevas fases basadas en semillas con los números mágicos que siguen después del 13 y 19.

§ 2.1 Métodos matemáticos para generar estructuras cuasiperiódicas

En el capítulo anterior se mencionaron dos maneras mediante las cuales se puede generar un mosaico de Penrose: las reglas de acoplamiento y las reglas de deflación. Ambas reglas generan una estructura cuasiperiódica con orden orientacional quinario. Sin embargo, existe la posibilidad de generar estructuras cuasiperiódicas con ordenes orientacionales distintos del quinario y que son cristalográficamente prohibidos. Por ello se han ideado métodos más generales tomando como punto de partida los mosaicos de Penrose. Los dos métodos más empleados son: corte y proyección y dual generalizado (MDG). Aunque el método de corte y proyección no será estudiado con gran detalle, conviene familiarizarse con él dado que algunos de sus conceptos son utilizados profusamente dentro del campo de los cuasicristales; aún en contextos distintos al de generar estructuras cuasiperiódicas.

Antes de entrar en materia es necesario aclarar que muchas veces se utilizan los términos cuasicristal y estructura cuasiperiódica como sinónimos, siendo que uno se refiere a la estructura física y el otro a la matemática. La razón de ello es que ambos se definen formalmente de un modo análogo. Esta definición formal requiere tres propiedades:

- 1) Orden orientacional. La estructura matemática deberá estar formada por celdas unidad cuyos lados se orienten a lo largo de un conjunto discreto de vectores; la estructura física requiere que los ángulos de enlace entre los átomos sólo tengan ciertos valores.
- 2) Separación mínima y máxima. Los átomos o puntos de red siempre estarán separados por una distancia mínima r y una máxima R .

En caso de que se cumpla la condiciones 2) se dirá que la estructura es un sistema de Delaunay [25].

3) **Orden translacional cuasiperiódico.** Esta condición requiere que cualquier función escalar de la red sea cuasiperiódica en el sentido de la ecuación (1.7).

Por último, es necesario dar algún criterio para poder diferenciar a los cuasicristales (o en su caso a las estructuras cuasiperiódicas) entre sí. Las diferencias no siempre son obvias; existen tres casos posibles, el más simple es aquél en el cual las estructuras difieren en el tipo de celdas unidad o en las configuraciones entre éstas. Otra posibilidad es que las estructuras sean totalmente congruentes si se le aplica a una de ellas una translación; entonces se dirá que éstas son *equivalentes*.

El último caso se da cuando las estructuras difieren globalmente aunque no sea posible distinguirlas localmente, es decir, cuando cualquier región finita que aparece en una se puede encontrar en la otra. Más concretamente, si dado un punto P en una de ellas y cualquier distancia finita d se puede encontrar una translación tal que ambas estructuras coincidan en una esfera de radio d centrada en P [25]. En ese caso se dirá que las estructuras son *localmente isomorfas* (LI).

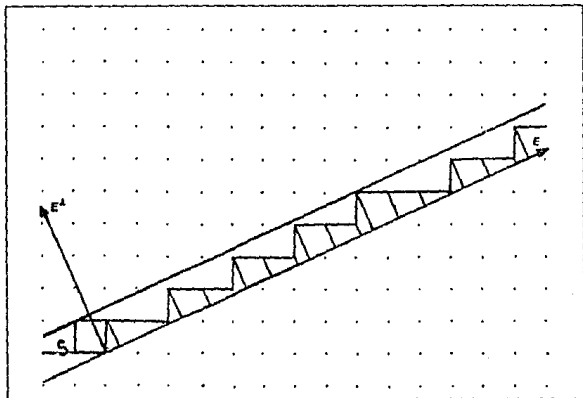
§ 2.2 Método de corte y proyección

La idea principal tras este método consiste en proyectar una red periódica en un cierto espacio a un subespacio de dimensión menor. No todos los puntos de la red son proyectados sino sólo aquellos que caen dentro de una región definida por el subespacio y la celda unidad de la red periódica; a dicha región se le llama banda (fig. 2.1).

El método puede ilustrarse muy fácilmente para el caso en el cual la estructura cuasiperiódica obtenida es unidimensional. Los conceptos involucrados en este ejemplo son casi inmediatamente aplicables a los casos de estructuras bi y tridimensionales.

Una estructura cuasiperiódica unidimensional (1D) es una secuencia aperiódica de dos intervalos de longitudes diferentes; la proporción entre ambos debe ser un número irracional. Para este caso se utiliza como red

periódica una red cuadrada situada en un espacio de dos dimensiones (2D). El subespacio al cual se debe proyectar es una línea recta (E) y la banda se forma desplazando la celda unitaria sobre la línea E. El trazo dejado por dicho desplazamiento es una franja paralela a E (ver la fig. 2.1)



(fig 2.1 Obtención de una estructura cuasiperiódica en 1D proyectando una red periódica de 2D sobre una recta con pendiente irracional.)

Si se proyectan sobre la recta E los puntos de red que caen dentro de la banda, se obtiene una sucesión de puntos sobre E. Para que dicha sucesión sea cuasiperiódica se requiere que la pendiente de E sea un número irracional [1]; de otro modo los puntos proyectados conformarían una sucesión periódica, tal como se puede observar claramente en la figura 2.1. El hecho de que la sucesión obtenida esté formada por dos intervalos básicos puede deducirse mediante el siguiente razonamiento: los puntos de la red cuadrada en \mathbb{R}^2 son de la forma:

$$r = \sum_{i=1}^N n_i e_i ; \quad (n_i \in \mathbb{Z}) \quad (2.2)$$

siendo los e_i vectores unitarios de la celda unidad, que en este caso es un

cuadrado. Cada uno de estos puntos r puede caer o no dentro de la banda, lo cual se escribe como:

$$d = \left(\sum_{i=1}^2 n_i e_i \right) W(r) ; \text{ donde: } W(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } r \text{ cae en la banda} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Aplicando sobre d la matriz Π de proyección de \mathbb{R}^2 a la recta E :

$$\Pi(d) = \Pi \left(\sum_{i=1}^2 n_i e_i \right) W(r), \quad (2.3)$$

y como Π opera sólo sobre vectores, la suma puede sacarse de la matriz:

$$\Pi(d) = \sum_{i=1}^2 n_i \Pi(e_i) W(r). \quad (2.4)$$

Haciendo $\Pi(e_i) = q_i$:

$$\Pi(d) = \sum_{i=1}^2 n_i q_i W(r) \quad (2.5)$$

De (2.5) se observa que la estructura resultante se forma con ciertas combinaciones lineales (aquellas para las cuales $W(r)$ es distinta de cero) de los vectores q_1 y q_2 . Los vectores q_1 y q_2 están en el mismo subespacio ya que son la proyección sobre la recta E de los vectores e_1 y e_2 respectivamente; de ello se infiere que q_1 y q_2 son colineales. La norma de cada uno de estos vectores viene dada, en términos del ángulo de inclinación de la recta (θ), por:

$$\|q_1\| = 1/\cos\theta \quad (2.6), \quad \|q_2\| = 1/\sin\theta \quad (2.7)$$

concluyéndose de aquí que la proporción entre las normas de q_1 y q_2 es un número irracional. En efecto, de (2.6) y (2.7) se obtiene la siguiente

expresión: $\|q_1\| / \|q_2\| = \tan\theta$; y por la construcción de la línea E la tangente de θ es un número irracional.

En la práctica el problema se ataca de manera inversa, es decir, la longitud deseada para los vectores q_1 determina la elección del subespacio al cual se va a proyectar. El número de vectores con longitudes diferentes (siempre en una proporción inconmensurable) determina la dimensión del espacio desde el cual se procede a realizar la proyección. Para el caso unidimensional con dos vectores inconmensurables el problema se limita a encontrar la pendiente de la recta dadas las normas.

La pendiente se encuentra notando que las proyecciones de e_1 y e_2 sobre E valen:

$$\|q_1\| = \langle e_1, a \rangle \quad (2.8)$$

$$\|q_2\| = \langle e_2, a \rangle \quad (2.9)$$

siendo a un vector unitario que determina la dirección de la recta E y que tiene componentes: (a_1, a_2) .

Realizando los productos punto indicados en (2.8) y (2.9) se obtiene :

$$\|q_1\| = a_1 \quad (2.10)$$

$$\|q_2\| = a_2 \quad (2.11)$$

Las expresiones anteriores permiten encontrar la inclinación de la recta E según la magnitud asignada a los vectores q_1 . Un caso muy importante de estructura cuasiperiódica unidimensional lo constituye la sucesión de Fibonacci la cual se forma con dos intervalos de tamaños uno y τ [26]. Aplicando (2.10) y (2.11) se encuentra que la dirección de la recta debe ser: $(1, \tau)$ porque:

$$\|q_1\| = 1 \quad y \quad \|q_2\| = \tau .$$

Como la pendiente de la recta es $m=(a_2/a_1)$, la recta E debe tener una pendiente τ para obtener la sucesión deseada.

Todo lo expuesto anteriormente se puede generalizar para obtener estructuras cuasiperiódicas de dimensiones mayores. Para ello considérese una red hipercúbica en un espacio de N dimensiones (denotado por E) :

$$r = \sum_{i=1}^N n_i e_i, \quad (n_i \in \mathbb{Z}) \quad (2.12)$$

donde los vectores e_i son los vectores definidos por la celda unidad de la red, la cual es un hipercubo. Si este hipercubo tiene lados unitarios, los vectores e_i pueden ser escogidos de modo que coincidan con la base canónica de E.

En el espacio E se considera un subespacio de dimensión n, al cual se le llama "paralelo" (E), por analogía al caso unidimensional. El subespacio E^\perp define a otro subespacio de dimensión (N-n), llamado "perpendicular" (E^\perp), cuyo conjunto de intersecciones con E tiene como único elemento el vector cero.

Debido a esto, el espacio E es la suma directa de sus subespacios perpendicular y paralelo: $E = E \oplus E^\perp$.

Así, cada punto x de E se puede descomponer como:

$$x = x'' + x^\perp. \quad (2.13)$$

La banda S es el conjunto:

$$S = \left\{ x = x'' + \sum_{i=1}^N \alpha_i e_i^\perp \mid x'' \in E, \alpha_i \in (-1, 0) \forall i \right\},$$

[27] ; donde e_i^\perp denota la componente del vector e_i en el subespacio perpendicular. A esta proyección se le llama ventana. Nótese que la

función de S es definir un "ancho" sobre E^\perp del subespacio E .

La estructura cuasiperiódica se obtiene de la proyección ortogonal de los puntos de la red r , que caen dentro de S :

$$d = \Pi(r)W(r); \quad (2.14)$$

si $W(r)$ es una función tal que:

$$W(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } r \in S \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

y Π es la matriz de proyección ortogonal de E sobre E^\perp .

Sustituyendo (2.12) en (2.14) :

$$d = \Pi \left\{ \sum_{i=1}^N n_i e_i \right\} W(r) = \left\{ \sum_{i=1}^N n_i \Pi(e_i) \right\} W(r)$$

ó:

$$d = \left(\sum_{i=1}^N n_i q_i \right) W(r), \quad \text{si } q_i = \Pi(e_i) \quad (2.15)$$

La igualdad (2.15) muestra que la estructura formada por los puntos d en el subespacio E^\perp es una combinación lineal, con coeficientes enteros, de N vectores, los cuales son la proyección de los vectores unitarios de la celda hipercúbica sobre E^\perp . Los elementos de la matriz Π se calculan por medio de las proyecciones de la base e_i sobre el subespacio E^\perp , las cuales valen :

$$\Pi_{ij} e_j = q_i$$

haciendo el producto punto por e_i en la expresión anterior:

$$\Pi_{ij} \langle e_j, e_j \rangle = \langle q_i, e_j \rangle$$

y como $\langle e_j, e_j \rangle = 1$:

$$\Pi_{ij} = \langle q_i, e_j \rangle \quad (2.16)$$

Utilizando (2.13) e_j puede escribirse como: $e_j = (e_j^{\parallel} + e_j^{\perp})$; y aprovechando que : $e_j^{\parallel} = q_j$, $e_j^{\perp} = q_j^{\perp}$, (2.16) se convierte en:

$$\Pi_{ij} = \langle q_i, e_j \rangle = \langle q_i, (q_j + q_j^{\perp}) \rangle,$$

pero $\langle q_i, q_j^{\perp} \rangle = 0$, de donde:

$$\Pi_{ij} = \langle q_i, q_j \rangle . \quad (2.17)$$

Para construir un mosaico de Penrose se necesitan cinco vectores q_i que formen un pentágono; así el espacio desde el cual se debe proyectar debe tener dimensión cinco ($N=5$). El subespacio que contendrá estructura resultante es un plano, por lo que la dimensión de E^n será dos ($n=2$). La matriz de proyección se calcula, según (2.17), realizando todos los productos puntos posibles entre los vectores de un pentágono.

El análogo tridimensional del Penrose se construye considerando una red hipercúbica en un espacio de dimensión $N=6$, y un subespacio de dimensión $n=3$. La elección del subespacio debe ser tal que la base canónica de \mathbb{R}^6 se proyecte sobre un icosaedro.

Se pueden construir otras estructuras con ordenes orientacionales diferentes; sin embargo sólo es posible hacerlo para estrellas de vectores q_i que sean proyectables de una red periódica. Si una estrella es proyectable de una red hipercúbica se dirá que es *eutáctica*.

§ 2.3 Método dual generalizado (MDG)

A) El esqueleto de un mosaico y la construcción de N-rejillas

El MDG es una generalización del método de multimallas desarrollado por De Bruijn para el embañosado de Penrose. Por medio del MDG se pueden construir estructuras cuasiperiódicas con cualquier simetría orientacional, pudiéndose reproducir todos los resultados obtenibles por otros métodos [26] y aún generar estructuras nuevas que no son obtenibles por medio de ellos .

El punto de partida para estudiar el MDG es una propiedad muy notable presentada por el mosaico de Penrose y más en general, por cualquier embañosado del plano que se forme con paralelogramos.

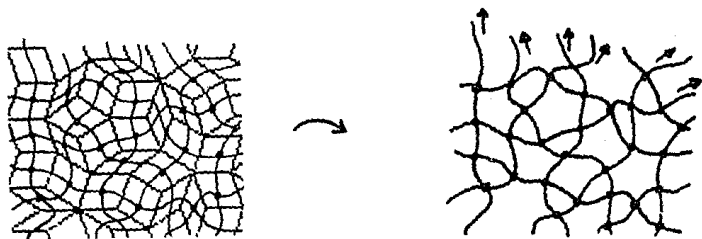
Esta propiedad es la siguiente: supóngase que de alguna manera se ha podido embañosar el plano con paralelogramos de modo que cada par de estos tengan un lado adyacente; entonces podemos caracterizar completamente el embañosado mediante una subestructura llamada el *esqueleto* [28].

El *esqueleto* de un embañosado se construye muy fácilmente; para ello considérese un lado cualquiera de alguno de los paralelogramos. Evidentemente, existen dos paralelogramos adyacentes al paralelogramo escogido que tienen sus lados paralelos al lado escogido. A su vez, paralelo a cada lado de estos dos paralelogramos, hay otros dos cuyos lados también son adyacentes a ellos. El proceso puede continuarse ad infinitum, resultando que el embañosado contiene una tira (infinita en ambas direcciones) con la característica de que para cada par de paralelogramos que se encuentran en ella, estos tienen dos lados iguales y paralelos al lado con el cual se empezó el proceso (ver la fig. 2.3).

Al lado con el cual se empezó le podemos asignar un vector que sirve para caracterizar la orientación de todos los lados que forman la tira.

Si se unen todos los puntos medios de los lados paralelos de cada paralelogramo en la tira, se obtiene una curva situada dentro de ella. Todo este tratamiento puede repetirse para cada lado con diferente orientación que contenga el mosaico.

Hecho esto, se pueden borrar los paralelogramos dejando las curvas y los vectores. El conjunto de curvas y vectores que quedan forman el esqueleto del mosaico (Nótese que la información contenida en el esqueleto no se altera si éste se distorsiona de modo que las curvas no lleguen a formar nuevos puntos de intersección).



(fig 2.2. Construcción del esqueleto de un mosaico en 2D)

Partiendo del esqueleto se puede reconstruir el mosaico (excepto por una translación); esto se consigue dibujando en cada punto de intersección de las curvas un paralelogramo definido por los vectores correspondientes a las curvas que pasan por él.

Este razonamiento conduce a pensar en la posibilidad de construir un embaledado partiendo del esqueleto. Este proceso no es tan sencillo como lo es la construcción del esqueleto partiendo del embaledado, aquí se requiere dar condiciones necesarias y suficientes para que el embaledado

no tenga huecos ni paralelogramos traslapados.

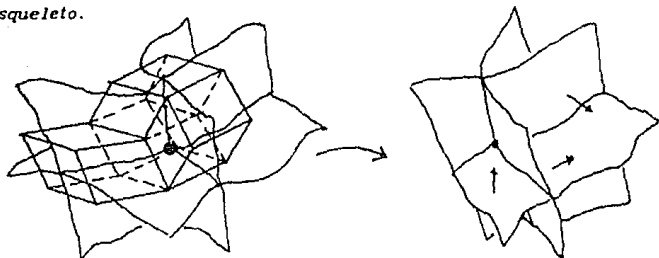
La primera restricción que debe imponerse al esqueleto es que no se intersecten nunca dos curvas cuyos vectores tengan la misma dirección; la razón de ello es que el paralelogramo no se puede cerrar con cuatro lados paralelos. También se requiere que en un punto de intersección no se corten más de dos curvas porque entonces el paralelogramo a dibujar no quedará bien definido. Mas adelante se verá que esta condición puede relajarse, sin embargo conviene conservarla por el momento.

Para evitar el traslape de paralelogramos se necesita orientar las curvas de modo que en cada punto de intersección la orientación sea congruente con los vectores asociados a cada curva. La asignación que se hace es la siguiente: si c_2 cruza a c_1 de derecha a izquierda, se conviene en que los vectores asociados, v_2 y v_1 respectivamente, sean tales que la rotación más corta que lleve a v_1 sobre v_2 sea en el sentido de las manecillas del reloj [28].

La construcción presentada del esqueleto muestra la dualidad entre el esqueleto y el mosaico; a cada punto de intersección le corresponde un paralelogramo y a cada región limitada por las curvas le corresponde un vértice del mosaico. También se observa que el mosaico puede ser visto como una decoración del esqueleto.

Se puede generalizar inmediatamente la construcción del esqueleto para una estructura tridimensional. Para ello supóngase dada una estructura cuasiperiódica tridimensional, formada por paralelepípedos adyacentes y que por pares tienen una cara en común. Tomando uno de ellos se traza una línea paralela a dos de los lados de la cara, de modo que una los puntos medios de los dos lados restantes. Lo mismo puede hacerse con la cara opuesta a ella. El proceso se repite para todos los sucesivos paralelogramos adyacentes que tienen una cara paralela al paralelogramo original. Todas las líneas obtenidas pueden ser envueltas en una superficie que las contenga. Como en el caso 2D, se le asigna a la superficie un vector para etiquetar la orientación de las caras que

representa. Haciendo todo esto repetidas veces para todas las posibles tiras se obtiene un conjunto de superficies y vectores que constituyen el *esqueleto*.



(fig 2.3. Construcción de un esqueleto en 3D.)

De aquí en adelante todos los esqueletos que serán usados son del tipo *N-rejilla*. Una *N-rejilla* se define en términos de una *rejilla*:

Definición 2.1). Una *rejilla* es un conjunto contable e infinito de curvas en dos dimensiones y superficies en tres dimensiones que nunca se intersectan. Asociada a la *rejilla* hay un vector e_1 que juega un papel importante en ella.

Definición 2.2). Una *N-rejilla*, es en 2D, un conjunto de *N* *rejillas* tal que una curva de la *i*-ésima *rejilla* intersecta a otra de la *j*-ésima en exactamente un punto para todo $i \neq j$. En caso de no cumplirse la última condición, la *N-rejilla* se llamará *singular*.

En 3D, una *N-rejilla* es un conjunto de *N* *rejillas* tridimensionales tales que para cualesquiera tres superficies en las *rejillas* *i*, *j* y *k* ($i \neq j \neq k$) éstas se intersectan en un sólo punto. En caso de que exista un punto donde se corten más de tres superficies, la *N-rejilla* será *singular*.

El tipo de *rejilla* más usado es la llamada *rejilla lineal*, la cual es un conjunto infinito de rectas paralelas, siendo todas perpendiculares a un vector q_1 . El análogo en 3D lo constituye un conjunto infinito de planos paralelos. La *rejilla* en cuestión se especifica totalmente por la

siguiente ecuación:

$$\langle x, q_1 \rangle = x_N \quad (2.18)$$

donde x_N es una sucesión monótona creciente.

La forma de la sucesión x_N da lugar a una subdivisión dentro de las rejillas lineales:

a) *periódicas*. Son aquellas en las cuales la secuencia x_N es periódica, es decir, los planos o líneas siempre están separados una distancia constante. La rejilla se determina totalmente si además de dar dicha distancia se da otra constante, γ_1 , que corresponde a un corrimiento completo de toda la rejilla. Se observa que la γ_1 juega el papel de fase para la rejilla. Resultará útil escribir la distancia entre dos planos o líneas en término de la norma del vector q_1 asociado a la rejilla. Así, la sucesión x_N toma la siguiente forma:

$$x_N = T \|q_1\|^2 (N + \gamma_1) \quad (2.19)$$

b) *cuasiperiódicas*. Son aquellas para las cuales la sucesión x_N es cuasiperiódica, es decir, la distancia entre líneas o superficies ($x_{N-1} - x_N$) varía cuasiperiódicamente. En el MDG se utilizan sucesiones del tipo:

$$x_N = T \|q_1\|^2 \left(N + \alpha + \frac{1}{\rho} \left[\frac{N}{\sigma} + \beta \right] \right) \quad (2.20)$$

donde $\alpha, \beta, \rho \in \mathbb{R}$; σ es un irracional y $[x]$ denota la función mayor entero menor o igual a x [26]. La sucesión dada por la expresión (2.20) es cuasiperiódica ya que consiste en una suma de dos sucesiones periódicas cuyos periodos son inconmensurables entre sí; (la sucesión $x_N = N$ tiene periodo uno, mientras que la sucesión $x_N = [N/\sigma]$ tiene periodo σ).

La expresión 2.20 define una secuencia de dos tipos de intervalos, tal como se demostrará a continuación.

Una identidad que resulta útil para lograr este propósito es:

$$x = [x] + \{x\} \quad (2.21)$$

donde $\{x\}$ denota la parte fraccionaria de x . Nótese que la función $\{x\}$ tiene período uno.

La diferencia entre dos términos sucesivos de (2.20) es:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q_1\|^2 \left[1 + \frac{1}{\rho} \left(\left[\frac{N}{\sigma} + \beta + \frac{1}{\sigma} \right] - \left[\frac{N}{\sigma} + \beta \right] \right) \right] \quad (2.22)$$

y de (2.21):

$$\frac{N}{\sigma} + \beta = \left[\frac{N}{\sigma} + \beta \right] + \left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} \quad (2.23)$$

de donde:

$$\left[\frac{N}{\sigma} + \beta + \frac{1}{\sigma} \right] = \left[\left[\frac{N}{\sigma} + \beta \right] + \left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \frac{1}{\sigma} \right] = \left[\frac{N}{\sigma} + \beta \right] + \left[\left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \frac{1}{\sigma} \right] \quad (2.24)$$

(en el último paso se usó que : $[x+M] = [x] + M$, si M es un entero).

Así, (2.22) se convierte en:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q_1\|^2 \left(1 + \frac{1}{\rho} \left[\left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \frac{1}{\sigma} \right] \right) \quad (2.25)$$

y aplicando la identidad (2.21) a $1/\sigma$:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q_1\|^2 \left(1 + \frac{1}{\rho} \left[\left[\frac{1}{\sigma} \right] + \left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} \right] \right) \quad (2.26)$$

Pero:

$$0 \leq \left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} < 1 \quad \text{y} \quad 0 \leq \left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} < 1$$

ó:

$$0 \leq \left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} < 2$$

La desigualdad anterior implica que:

$$\left[\left\{ \frac{N}{\sigma} + \beta \right\} + \left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} \right] = 0, 1 \quad (2.27)$$

Entonces, según (2.26), la expresión (2.25) sólo toma los valores:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q\|^2 \left(1 + \frac{1}{\rho} \left(\left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} \right) \right)$$

ó:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q\|^2 \left(1 + \frac{1}{\rho} \left(\left\{ \frac{1}{\sigma} \right\} + 1 \right) \right)$$

Se observa que ρ y σ determinan el tamaño de los intervalos que aparecen en la sucesión (2.21). Para σ mayor que uno, las expresiones anteriores muestran que los espaciamentos entre los términos de la sucesión son:

$$x_{N+1} - x_N = T \|q\|^2 \quad \text{y} \quad x_{N+1} - x_N = T \|q\|^2 \left(1 + \frac{1}{\rho} \right)$$

El parámetro α que aparece en (2.20) corresponde a un corrimiento completo de la sucesión; mientras que β altera la secuencia de intervalos cortos y largos.

Dándole a σ y ρ el valor τ se obtiene la sucesión de Fibonacci [29]. Dicha sucesión contiene dos intervalos de tamaños:

$$S = T \| q \| \quad \text{y} \quad L = T \| q \| \left(1 + \frac{1}{\tau} \right)$$

ya que $\tau > 1$.

Con las rejillas lineales se pueden construir varios tipos de N -rejillas donde cada una de ellas sea periódica o cuasiperiódica.

Los tipos más importantes que se pueden construir son:

i) Una N -rejilla lineal periódica. Es una N -rejilla donde cada rejilla es lineal y periódica.

ii) Una N -rejilla lineal cuasiperiódica. Es una N -rejilla donde cada rejilla es lineal y cuasiperiódica. Como caso particular de esta rejilla está la llamada N -rejilla lineal de Fibonacci, la cual se forma con rejillas lineales espaciadas según la sucesión de Fibonacci.

Como ejemplo del caso a) se tiene la pentarejilla periódica en 2D. Esta es una 5-rejilla, compuesta por cinco familias de líneas. En cada una de las familias, las rectas son paralelas y se orientan perpendicularmente a uno de cinco vectores definidos por un pentágono:

$$q_i = \left(\cos\left(\frac{2\pi i}{5}\right), \sin\left(\frac{2\pi i}{5}\right) \right) \quad \text{donde: } i=0,1,\dots,4.$$

Si el espaciamiento entre las líneas es periódico y unitario, la pentarejilla se determina completamente si se dan cada una de las fases para cada dirección. Nótese que si todas las fases valen cero, la pentarejilla será singular porque todas las líneas se cruzarán en el origen.

Otro ejemplo es una hexarejilla, la cual es una 6-rejilla lineal

periódica en 3D, cuyas rejillas que la componen se orientan perpendiculares a los vectores definidos por cada uno de los seis ejes de simetría cinco de un icosaedro:

$$q_i = (\text{sen}\beta\cos(\frac{2\pi i}{5}), \text{sen}\beta\text{sen}(\frac{2\pi i}{5}), \cos\beta);$$

donde $i=0, \dots, 4$, $\cos\beta=5^{-1/2}$; y:

$$q_5 = (0, 0, 1)$$

Si en los dos ejemplos anteriores se escogen sucesiones cuasiperiódicas en vez de la periódicas, se obtienen las rejillas conocidas como: pentarejilla lineal cuasiperiódica y hexarejilla lineal cuasiperiódica respectivamente.

Para determinar completamente a estas nuevas N-rejillas se necesitan especificar los parámetros ρ, σ, α y β para cada i -ésima rejilla (es decir, para cada familia de planos o líneas).

Cuando se habló de la construcción del esqueleto, se mencionó la posibilidad de ver a los mosaicos como una decoración del esqueleto. Sin embargo, se les requirió a los esqueletos ciertas condiciones. Aprovechando este punto de vista, las N-rejillas pueden verse como una subestructura del mosaico; pero sólo bajo determinadas condiciones formaran por sí mismas una red cuasiperiódica. Las condiciones pedidas a la N-rejilla para lograr esto, consisten en que los puntos de intersección de las curvas o superficies que forman la N-rejilla tengan:

- i) Orden translacional cuasiperiódico.
- ii) Orden orientacional.
- iii) Separación mínima entre los puntos

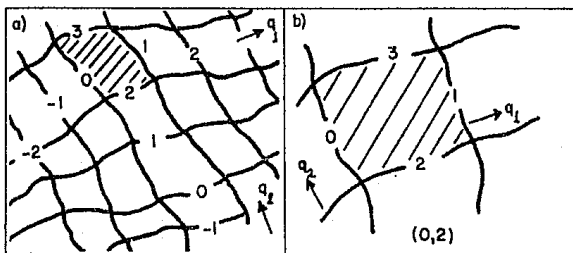
Si una N-rejilla cumple con estas tres condiciones, se dirá que es una *cuasired*.

B) La transformación dual

Partiendo de la N -rejilla, es necesario dar una manera concisa de construir el mosaico. Para conseguir esto, se observa que para cualquier N -rejilla se puede asignar a cada curva (o superficie) que la forman, un número entero de acuerdo a la posición ordinal que esta ocupa en la i -ésima rejilla (tomándose como sentido positivo el dado por el sentido del vector q_i). En la figura 2.4 se ejemplifica esta numeración para el caso de una 2-rejilla. Entonces, a cada región limitada por curvas se le pueden asignar N enteros: K_i , donde $i=0,1,\dots,N$.

La asignación de estos enteros se realiza del siguiente modo: la región en cuestión está siempre entre dos curvas correspondientes a una misma rejilla de las N rejillas que se tienen. En particular, con respecto a la i -ésima rejilla, se sitúa entre las curvas (o superficies) numeradas como K_i y K_i+1 ; entonces, el entero que se le asignará a la región con respecto a la i -ésima rejilla será el entero K_i .

El proceso se repite para cada rejilla desde cero hasta N . Los enteros encontrados con respecto a cada una de las rejillas pueden anotarse en forma de enada ordenada: (K_0, K_1, \dots, K_N) , donde cada uno de los enteros corresponde a la posición ordinal de la curva en la rejilla $0, 1, 2$ hasta la rejilla N .



(fig 2.4. a) ejemplo de como se numeran las curvas en una

2-rejilla atendiendo a la numeración ordinal que les corresponde dentro de cada una de las dos rejillas; y b) asignación de los enteros que le corresponden a cada región).

La transformación dual que mapea a dicha región en un punto del espacio dual es:

$$t = \sum_{i=0}^N K_i q_i \quad (2.28)$$

; donde q_i es el vector asociado a la i -ésima rejilla [30]. La transformación anterior es simplemente una combinación lineal de los vectores q_i cuyos coeficientes son las coordenadas ordinales respecto a cada rejilla. Esta transformación es idéntica a la que se llegó en el método de corte y proyección; la diferencia estriba en el método para obtener los coeficientes K_i ; de hecho Gähler y Rhyner [31] han probado que ambos métodos son equivalentes cuando se utilizan rejillas lineales periódicas en el MDG.

En este sentido el MDG es más general porque contiene al método de corte y proyección. Los mosalcos obtenidos con rejillas cuasiperiódicas por el MDG pertenecen a clases de isomorfismos no obtenibles por corte y proyección [26].

Los puntos t son vértices de un paralelogramo (o paralelepípedos en 3D) que forman una estructura cuasiperiódica, mientras que cada punto de intersección de las curvas (o superficies) se mapea al interior de los paralelogramos (o paralelepípedos). Este hecho, junto con sus implicaciones, se estudiará primero para el caso bidimensional, y posteriormente se analizará el caso tridimensional, ya que ambos son muy parecidos.

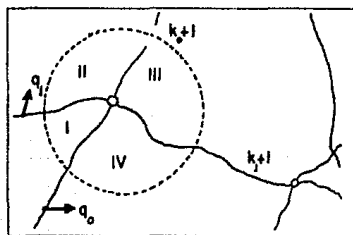
Para mostrar que los puntos t dados por (2.28) son vértices de un paralelogramo es necesario analizar que sucede en las inmediaciones de un punto de intersección de la rejilla; para ello se supondrá que en dicho punto no se intersectan más de dos curvas. Si en el punto se intersecta una curva perteneciente a la i -ésima rejilla con una de la j -ésima, existe

una vecindad del punto en la cual no hay otras curvas que la atraviesen; esto indica que a todos los puntos de esta vecindad le corresponden las mismas coordenadas ordinales con respecto a las curvas que no pertenecen a la i -ésima y j -ésima rejillas. De esto se infiere que los puntos en la vecindad comparten $N-2$ coordenadas ordinales con respecto a las rejillas distintas de i y j .

Sin embargo, en dicha vecindad, las dos curvas de las rejillas i y j la dividen en *cuatro regiones*, a cada una de las cuales le corresponden cuatro valores ordinales diferentes con respecto a la i -ésima y j -ésima rejilla. A continuación se mostrará que cada una de estas regiones contiguas dan lugar a un vértice diferente de un mismo paralelogramo.

Sin ninguna pérdida de generalidad, y sólo por simplificar la explicación, supóngase que la intersección estudiada se forma con curvas pertenecientes a la rejilla cero y uno; siendo la posición de estas curvas, con respecto a las rejillas cero y uno (K_0+1) y (K_1+1) respectivamente. Las cuatro regiones en las cuales se divide la vecindad del punto de intersección se denotarán por los números romanos: I, II, III, IV, tal como muestra la figura 2.5.

A cada una de estas regiones le corresponden las siguientes coordenadas ordinales respecto a cada rejilla:



I \longrightarrow $(K_0, K_1, K_2, \dots, K_N)$

II \longrightarrow $(K_0, K_1+1, K_2, \dots, K_N)$

III \longrightarrow $(K_0+1, K_1+1, K_2, \dots, K_N)$

IV \longrightarrow $(K_0+1, K_1, K_2, \dots, K_N)$

(fig 2.5 Vecindad de una intersección).

donde las $N-2$ coordenadas :

$K_2, K_3, K_4, \dots, K_N$, son comunes a las cuatro regiones.

La región I se mapea, mediante la transformación (2.8) a un punto, el cual se denotará como $P(I)$, dado por:

$$P(I) = K_0 q_0 + K_1 q_1 + K_2 q_2 + \dots + K_N q_N .$$

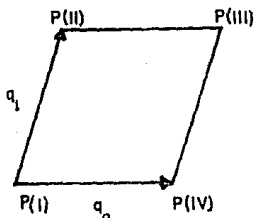
Las otras tres regiones se mapean, según las coordenadas ordinales obtenidas para cada región a:

$$P(II) = P(I) + q_1$$

$$P(III) = P(I) + (q_0 + q_1)$$

$$P(IV) = P(I) + q_0$$

Estos tres puntos, junto con $P(I)$, forman un rombo cuyos lados están formados por los vectores q_0 y q_1 (ver la fig. 2.6).



(fig. 2.6 Rombo formado al mapear las cuatro regiones)

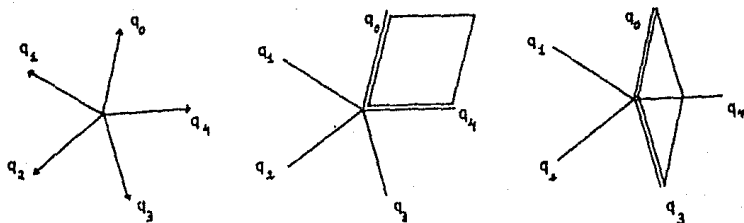
De esto se derivan varias conclusiones:

1) La forma de la celda que corresponde, bajo la transformación dual, a un punto de intersección depende únicamente de las dos rejillas a las cuales pertenecen las curvas que se intersecan; es decir, para cualquier punto de intersección de la rejilla i -ésima con la j -ésima, el paralelogramo asociado estará formado por los puntos:

$$P_i, P_i + q_1, P_i + q_j, P_i + q_1 + q_j.$$

ii) De i) se deduce que los tipos de celdas que aparecen en un mosaico pueden encontrarse formando paralelogramos con todas las combinaciones posibles, tomadas por pares, de los N vectores asociados a la N-rejilla.

Para un patrón de Penrose, los vectores asociados a la rejilla son cinco, y apuntan hacia los vértices de un pentágono. Si se numeran los vectores del 0 al 4 como aparece en la figura 2.7, se observa, por ejemplo, que el rombo gordo se forma con las combinaciones del vector 0 con los vectores 1, 2 y 4; si se considera las posibles intersecciones de la rejilla 0 con la 1, 2 y 4. El rombo delgado aparece cuando la rejilla 0 se intersecta con la 3.



(fig 2.7 Construcción de un rombo gordo y un rombo delgado utilizando una estrella de vectores pentagonal.)

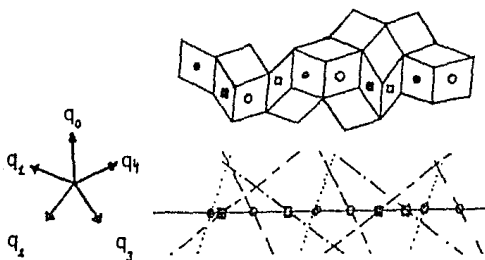
iii) El número máximo de tipos distintos de celdas que pueden darse en un mosaico son todas las combinaciones que se puedan hacer con N vectores tomados por parejas:

$$C_2^N = \frac{N(N-1)}{2!}$$

iv) La transformación dual induce una translación completa del mosaico respecto a la rejilla. Esto resulta claro ya que en general el punto P(1) no se mapea a la región I, tal como se esperaría al decir que el mosaico es una decoración de la N-rejilla. Sin embargo, es posible lograr esto aplicando una translación al mosaico, de modo que la N-rejilla y el mosaico sean otra vez congruentes.

Una translación adecuada para ello se puede obtener aplicándole a una vecindad cualquiera la transformación dual; como resultado se vió que se obtiene un paralelogramo trasladado. Entonces la translación requerida será aquella que lleve al centro del paralelogramo al punto de intersección que le dió origen.

v) En una N-rejilla lineal los lados de los paralelogramos son perpendiculares a las líneas que le dieron origen. Esto se debe a que los lados del paralelogramo se forman con la pareja de vectores que son justamente perpendiculares a sus respectivas líneas. (Ver la fig. 2.8).

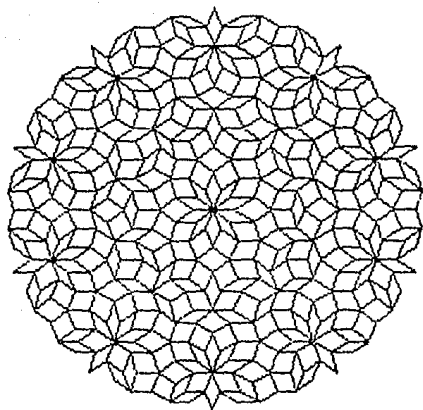


(fig. 2.8 Perpendicularidad entre los lados de los paralelogramos y las líneas de un rejilla).

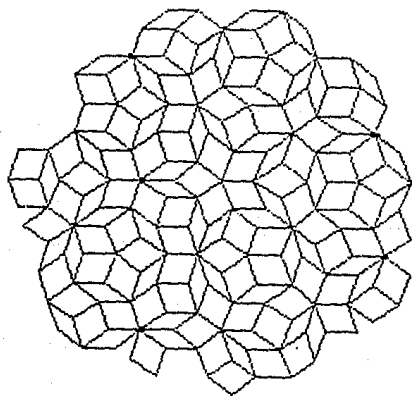
En la figura 2.9 se muestran varios mosaicos obtenidos por el MDG utilizando varias estrellas de vectores, utilizando rejillas lineales periódicas y cuasiperiódicas con diversos parámetros.

El análisis aquí desarrollado permite estudiar que sucede en una N-rejilla singular, es decir, cuando existen puntos de intersección formados por más de dos curvas. El caso más simple sucede cuando se intersecan tres curvas. Recurriendo otra vez al análisis de una vecindad del punto en cuestión se observa que ahora hay *seis regiones* en vez de las cuatro que se tenían anteriormente. Otra vez se supondrá que las curvas que se intersecan son las pertenecientes a las rejillas 0,1 y 2, numeradas como K_0+1 , K_1+1 y K_1+1 . (Ver la figura 2.10)

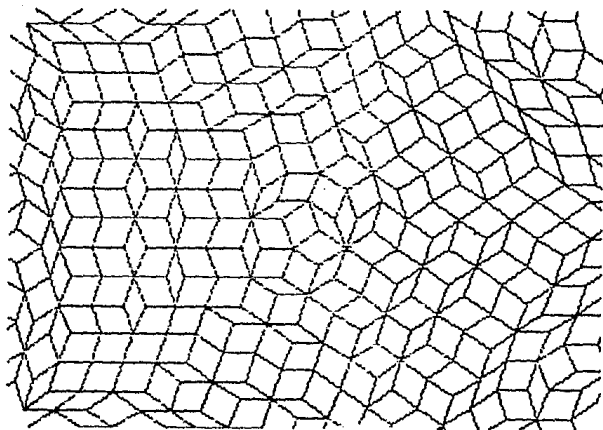
a)



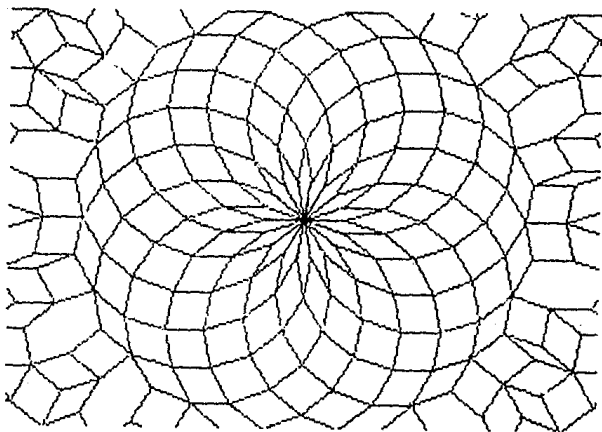
b)



c)



d)

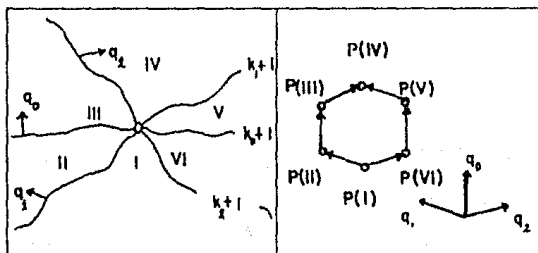


(fig. 2.9 a) Mosaico generado como dual de una pentarejilla periódica $\gamma_i = 1/2 \vee i=0, \dots, 5$; $T=1$. b) Dual de una pentarejilla de Fibonacci, $\alpha_i = \beta_i = 0 \vee i=0, \dots, 5$. c) Dual de una pentarejilla cuasiperiódica: $\alpha_i = 0$, $\beta_i = 1/2$, $\rho_i = 2^{-5/2}$, $\sigma_i = 3^{3/2} \vee i=0, \dots, 5$. d) Mosaico generado a partir de una estrella nonagonal, rejilla periódica, $\gamma_i = 0 \vee i=0, \dots, 8$.)

Las encadas que se forman, junto con los puntos a los cuales se mapea cada región bajo la transformación dual, son:

$$\begin{aligned}
 \text{I} &\longrightarrow (K_0, K_1, K_2, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I}) \\
 \text{II} &\longrightarrow (K_0, K_1+1, K_2, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I})+q_1 \\
 \text{III} &\longrightarrow (K_0+1, K_1+1, K_2, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I})+q_0+q_1 \\
 \text{IV} &\longrightarrow (K_0+1, K_1+1, K_2+1, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I})+q_0+q_1+q_2 \\
 \text{V} &\longrightarrow (K_0+1, K_1, K_2+1, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I})+q_0+q_2 \\
 \text{VI} &\longrightarrow (K_0, K_1, K_2+1, \dots, K_N) \longrightarrow P(\text{I})+q_2
 \end{aligned}$$

estos seis puntos conforman un hexágono, tal como se vé en la figura 2.10.



(fig 2.10 a) Vecindad de una singularidad formada por tres curvas y b) transformación dual de la misma región)

En general, la transformación dual aplicada a una vecindad de un punto singular dá lugar a un polígono, cuyo número de vértices es igual al número de regiones con coordenadas diferentes que rodean al punto singular en una vecindad en la cual no pasen otras curvas que las que generan la intersección. Por ejemplo, si en una pentarejilla existe un punto donde se intersecan cinco curvas, la vecindad del punto se divide en diez

regiones, las cuales se mapean a un decaedro.

Cuando en un punto se intersectan tantas curvas como vectores tenga la rejilla, tal como se menciona en el ejemplo anterior, se dirá que la rejilla es *excepcionalmente singular*; este caso es muy frecuente y se presenta en las rejillas lineales periódicas en las cuales cada γ_1 es igual a cero o en las rejillas lineales cuasiperiódicas cuando cada α_1 vale cero; el punto que da lugar a la singularidad es en ambos casos el origen.

En principio, cada singularidad puede resolverse mediante un corrimiento de las curvas de modo que las curvas ya no se intersecten en un sólo punto, sino en varios puntos que resulten ser no singulares. El resultado de esta pequeña perturbación de la rejilla es que el polígono que aparecía al mapear el punto singular queda decorado con las celdas elementales; es decir, de rombos. La razón de ello es que al desplazar las curvas aparecen nuevas regiones las cuales se mapean al interior de los polígonos, ya que las regiones que dieron lugar al polígono mantienen sus mismas coordenadas ordinales para perturbaciones pequeñas.

La decoración del polígono que se obtiene mediante la perturbación no es única, sino que depende de la dirección o de la curva que se traslada; en general, mientras mayor es el número de curvas que se intersectan en un punto, el número de decoraciones posibles también es mayor.

Para ilustrar este procedimiento se mostrará como resolver una singularidad simple del tipo que dá lugar a un hexágono, por lo cual se hará referencia a la figura 2.10. La perturbación puede inducirse en cualquiera de las curvas, en vista de ello supóngase que la curva trasladada es la perteneciente a la rejilla dos. Si la curva se mueve en la dirección q_2 aparece una nueva región con coordenadas ordinales :

$$VII \rightarrow (K_0+1, K_1, K_2, \dots, K_N)$$

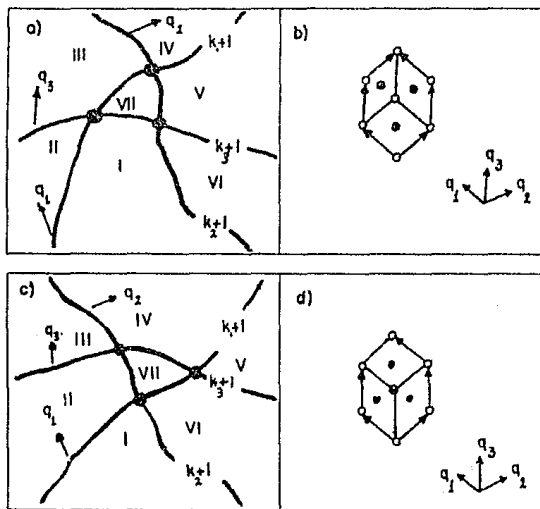
que se mapea a: $P(I)+q_0$

Este punto está dentro del hexágono (ver la fig. 2.11) y mues- tra

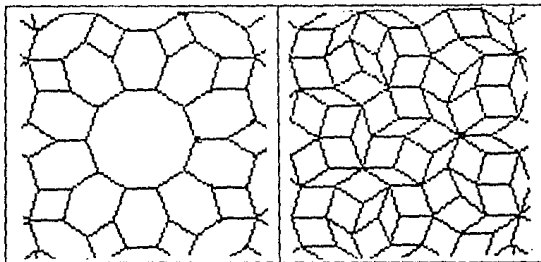
que el hexágono se forma con tres rombos. Otra posibilidad para resolver la singularidad es mover la rejilla en sentido contrario al del vector q_2 . En este caso se obtiene una decoración alternativa :

$$VII \rightarrow (K_0, K_1+1, K_2+1, \dots, K_N) \rightarrow P(I)+q_1+q_2.$$

En la figura 2.12 se muestra un mosaico de Penrose excepcionalmente singular en el cual se observa un decaedro y varios hexágonos; a la izquierda aparece el mismo mosaico en el cual se han resuelto las singularidades con las celdas elementales (Nótese la decoración del decaedro del centro).



(fig. 2.11. a) vecindad de un punto singular idéntico a la figura 2.10, pero aquí se ha movido la curva de la rejilla 2, apareciendo una nueva región (VII) b) se muestra el punto dual de la región (VII) c) aquí la translación se realizó en sentido inverso a la de a); d) dual de la vecindad que aparece en c))



(fig 2.12. a) Mosalco de Penrose excepcionalmente singular y b) resolución de las singularidades del mosalco del recuadro a).

Generalmente se prefiere estudiar los mosaicos singulares en términos de los polígonos en vez de resolver las singularidades por el método expuesto [29]. La razón de ello es que los polígonos son una manera natural de "empaquetar" las celdas elementales.

Dado cualquier polígono obtenido como dual de un punto singular, el número de celdas elementales que contendrá, para cualquier decoración, será:

$$C_2^G = \frac{G!}{2!(G-2)!} = \frac{G(G-1)}{2}$$

donde G es el número de curvas que se intersectan en el punto que dió lugar al polígono. Por ejemplo, el decágono corresponde al dual de un punto donde se intersectan cinco curvas ($G=5$), de donde, aplicando la fórmula expuesta, se concluye que el número de celdas que contendrá cualquier decoración elemental de dicho polígono es diez. El hexágono ($G=3$) contendrá tres celdas, tal como se había visto. Si la decoración no es elemental (en el sentido de que el polígono se decora con otros polígonos formados por celdas elementales) se tiene la siguiente desigualdad:

$$\# \text{polígonos} \leq C_2^G$$

Esta fórmula se obtiene de considerar el hecho de que cada celda

proviene de aplicarle la transformación (2.28) a un punto de intersección situado en la N -rejilla. Al remover una singularidad donde se cruzan G curvas, aparecen nuevos puntos de intersección con la propiedad de que sólo se intersectan en ellos dos curvas (correspondientes a cada celda elemental). Los nuevos puntos de intersección se forman intersectando entre sí todas las G curvas tomadas de dos en dos; así, el número de nuevos puntos de cruce son justamente la combinaciones que se puedan formar de G curvas tomadas de dos en dos.

El número de vértices (y caras) en dos dimensiones de un polígono es:

$$\#vértices(caras)=2G$$

Esta fórmula se deduce de las siguientes observaciones. Cada vértice del polígono corresponde a una región situada entre cada par de curvas que se cruzan en el punto singular. Así, basta contar el número de regiones que se encuentran en la vecindad de dicho punto. Este conteo se realiza del siguiente modo: dadas dos curvas, estas generan cuatro regiones. Por cada curva extra que pasa por el punto se obtienen dos regiones extras, de donde:

$$\#regiones=4+(G-2)2=2G$$

Por otra parte, como los lados del polígonos son perpendiculares a las líneas de las rejillas que le dan origen, y por dar lugar éstas a dos de los lados paralelos del polígono, el número de lados de dichas formas es dos veces el número de líneas que pasan por el punto, es decir: $2G$. La siguiente tabla resume las características de los polígonos derivados de singularidades para algunos valores de G :

| G | $\#(Caras, lados)$ | Nombre | $\#celdas$ |
|-----|--------------------|------------|------------|
| 2 | 4 | Rombo | 1 |
| 3 | 6 | Hexágono | 3 |
| 4 | 8 | Octágono | 4 |
| 5 | 10 | Decágono | 10 |
| 6 | 12 | Dodecágono | 15 |

Todo lo dicho anteriormente para mosaicos bidimensionales es análogo al caso tridimensional; así que se seguirá a continuación un esquema similar al desarrollado para 2D.

En 3D, los puntos de intersección se forman donde se cruzan tres superficies pertenecientes a tres rejillas distintas (i, j, k ; donde $i \neq j \neq k$). En cada uno de estos puntos existe una vecindad por donde no pasan otras curvas que las que dan lugar a la intersección, por lo cual todas las regiones contenidas en la vecindad del punto tienen las mismas coordenadas ordinales con respecto a las rejillas distintas de i, j y k . Por otra parte, la vecindad queda dividida en ocho regiones por las superficies de las rejillas i, j y k . Cada una de estas ocho regiones dan lugar a ocho vértices diferentes de un mismo paralelepípedo. El motivo es que cada curva divide a la región en dos pedazos, a cada pedazo se le asigna un entero distinto con respecto a la rejilla a la cual pertenece la curva; sin embargo, ambos enteros son consecutivos. La razón de esto es que al pasar de una región a la otra se ha cruzado sólo una curva, lo cual equivale a aumentar en una unidad la coordenada ordinal respectiva, si la curva se cruza en el sentido positivo de la numeración.

Entonces, bajo la transformación dual, cada región da lugar a los siguientes ocho puntos:

$$P_1, P_1+q_1, P_1+q_j, P_1+q_k, P_1+q_1+q_j, P_1+q_1+q_k, P_1+q_j+q_k, P_1+q_1+q_j+q_k$$

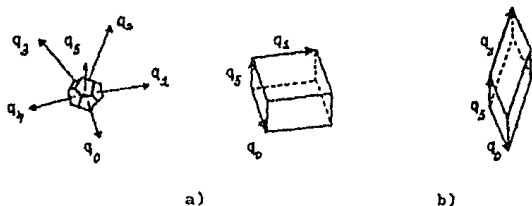
que conforman un paralelepípedo cuyos lados son los vectores q_1, q_j, q_k .

De ello se derivan las conclusiones siguientes:

1) Como los paralelepípedos se forman con tres vectores distintos pero que pertenecen a la estrella asociada a la N -rejilla, se concluye que cualquier mosaico construido con dicha rejilla tendrá como celdas unidades aquellos paralelepípedos que se puedan hacer con combinaciones de N

vectores tomados de tres por tres. Este resultado es muy útil porque permite conocer todas las celdas elementales que pueden aparecer en el mosaico dada una estrella de vectores; aún antes de haber hecho el mosaico.

Lo anterior puede aplicarse para encontrar las configuraciones posibles de las celdas en un patrón de Penrose tridimensional; el cual utiliza como estrella seis de los vectores que definen los ejes de simetría cinco del icosaedro. Combinando los seis vectores de tres en tres, se encuentra que se forman dos tipos de paralelepípedos (fig. 2.13); uno prolato y el otro oblató; los cuales son los análogos de los rombos gordo y delgado del mosaico de Penrose bidimensional.



(fig. 2.13 a) Paralelepípedo prolato, se puede obtener, por ejemplo, combinando el vector 0 con el 1 y 5; y b) paralelepípedo oblató. Se puede obtener combinando el vector 0 con el 2 y 5.

ii) De lo dicho en i) se concluye que el número máximo de celdas elementales que aparece en un mosaico es:

$$C_3^N = \frac{N(N-1)(N-2)}{3!}$$

iii) La transformación dual induce una translación completa del mosaico respecto a la rejilla. La razón de esto es idéntica a la expuesta en el caso bidimensional. El método que permite volver a hacerlas coincidir también es análogo.

iv) En una N -rejilla lineal tridimensional, las caras de los paralelepípedos son perpendiculares a cada pareja de planos que les dieron origen al realizar la transformación dual, porque cada cara se forma con dos vectores los cuales son perpendiculares a cada plano.

En la figura 2.14 se muestra un mosaico de Penrose tridimensional formado al aplicarle la transformación dual a una N -rejilla lineal.

El estudio de las N -rejillas singulares tridimensionales es importante porque generalmente contiene elementos de simetría adicionales que no tienen las N -rejillas no singulares. Así, una N -rejilla cuyas γ_i o α_i sean todas cero (razón por la cual es excepcionalmente singular en el origen) contiene un centro de inversión.

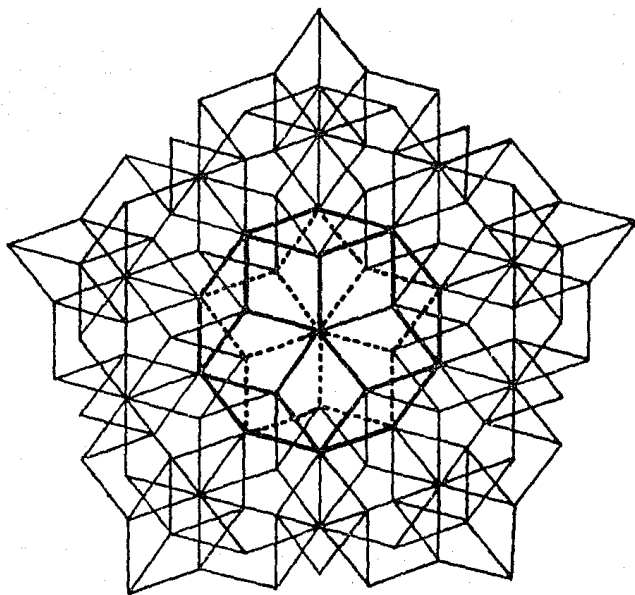
La N -rejilla singular más simple es aquella que contiene puntos en los cuales se cruzan superficies de cuatro rejillas solamente. En una vecindad pequeña del punto, en el sentido que se ha estudiado, las superficies la dividen en catorce regiones. Cada una de estas regiones dá lugar a un punto en el espacio dual; los cuales son vértices diferentes de una misma forma geométrica de catorce vértices y doce caras, conocida como dodecaedro rómbico (fig. 2.15). Esto se deduce al aplicarle la transformación dual a un punto donde se cruzan cuatro curvas.

El siguiente tipo de singularidad es aquella en la cual se cruzan en un punto cinco superficies. En este caso se obtiene como dual del punto una forma conocida como icosaedro rómbico (fig. 2.15 b)).

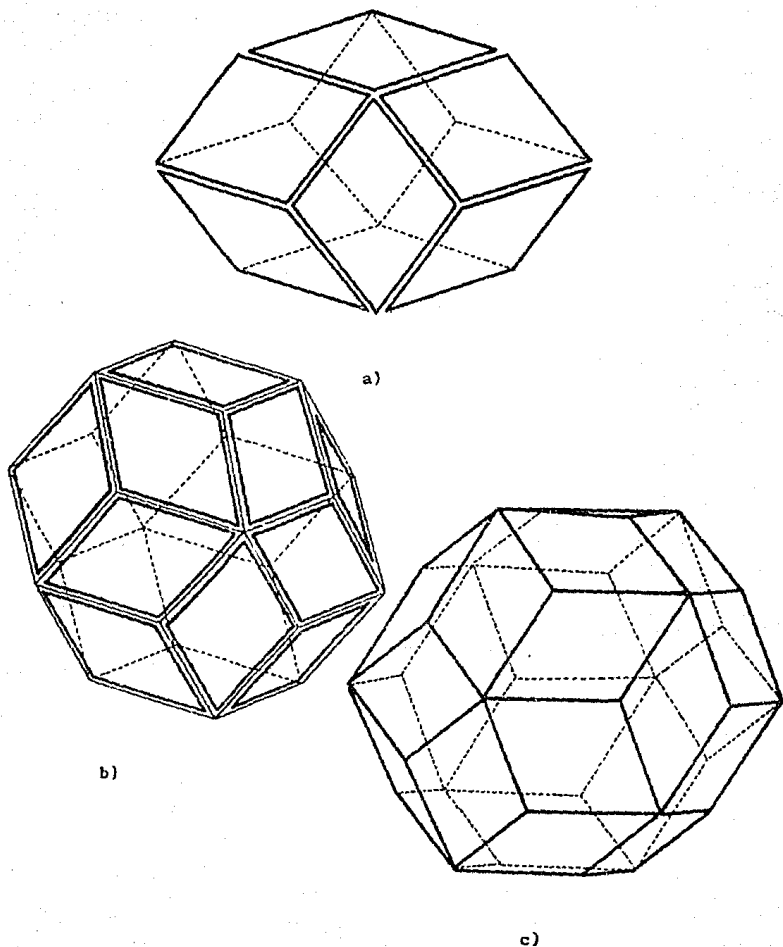
Cuando se cruzan seis superficies en un punto la vecindad del punto se divide en treinta y dos regiones las cuales generan una forma conocida como triacontaedro [29] (fig. 2.15 c)).

El número de formas que se pueden encontrar depende del número de vectores y de las rejillas que se cruzan en el punto. Mientras más vectores se cruzan en un punto mayor será el número de vértices del poliedro dual. A todos estos poliedros se los conoce como *zonoedros*, los

cuales son poliedros cerrados que contienen parejas de caras paralelas [29].



(fig. 2.14 Mosaico de Penrose tridimensional)



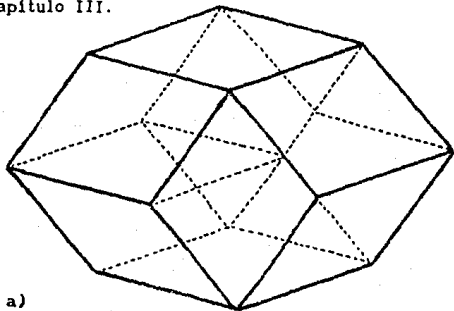
(fig. 2.15. a) Dodecaedro rómbico b) Icosaedro rómbico c)
Triacontaedro)

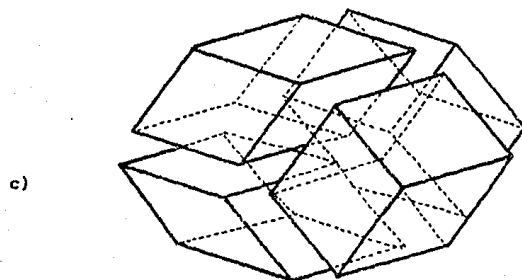
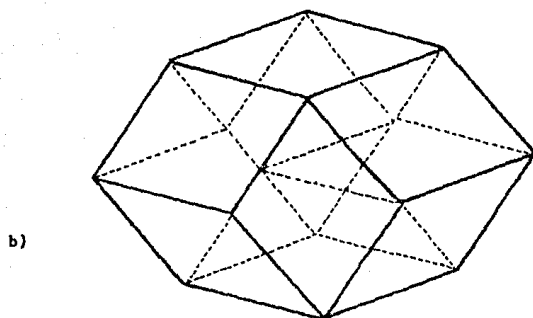
Las singularidades también pueden ser resueltas como en 2D, es decir, corriendo ligeramente las superficies que se cruzan en una intersección de modo que surjan nuevos puntos de intersección donde sólo se crucen tres superficies. Como resultado aparecerán nuevos puntos que servirán de decoración *interna* a los zonoedros.

Así, para una singularidad formada por cuatro superficies se obtendrá una región extra al mover una de las superficies. Entonces habrá cuatro puntos de intersección cada uno de los cuales genera un paralelepípedo diferente, o de otro modo, la región extra dá lugar a un nuevo punto en el dual que completa las celdas elementales dentro del zonoedro. En la *fig. 2.16* se observa el resultado de mover una de las superficies en una singularidad simple; apareciendo un punto en el interior del dodecaedro rómbico. También se muestra el dodecaedro desarmado en sus celdas elementales. La decoración no es única, si la superficie se desplaza en dirección contraria la decoración es diferente (*fig. 2.16 a*) y *b*)).

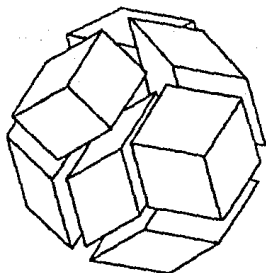
En la figura 2.17 se muestran algunas de las piezas que forman al icosaedro rómbico.

A continuación se presentan algunas fórmulas relativas al número de caras, vértices y aristas de los zonoedros asociados a una singularidad. Estas fórmulas se desarrollaron en este trabajo para verificar el funcionamiento correcto de los programas cómputo que serán expuestos en el capítulo III.





(fig. 2.16 a) y b) Dos decoraciones alternativas del dodecaedro rómbico.
c) El dodecaedro rómbico de la figura a) desarmado).



(fig. 2.17 Icosaedro rómbico desarmado en celdas elementales)

El número máximo de celdas elementales con las cuales se puede decorar un zonoedro, obtenido por medio de la transformación dual de un punto singular por el que pasan G superficies es:

$$\#celdas = C_3^G = \frac{G(G-1)(G-2)}{6}$$

Para calcular el número de caras de un zonoedro se requiere del resultado (iv) referente a mosaicos tridimensionales. Allí se dijo que cada cara es perpendicular a cada pareja de planos; pero el número de parejas de planos que se pueden formar es:

$$\#parejas \text{ de planos} = C_2^G$$

pero por cada pareja existen dos caras paralelas del zonoedro de donde:

$$\#caras = 2C_2^G = G(G-1)$$

Dado el número de caras es sencillo calcular el número de aristas; en efecto, cada cara se forma por cuatro aristas pero cada arista se comparte con dos caras de donde:

$$\#aristas = \frac{4}{2} G(G-1) = 2G(G-1)$$

Si todos los vectores de la estrella miden lo mismo, las aristas también serán iguales entre sí; entonces el zonoedro será un poliedro regular pudiéndose aplicar la conocida fórmula de Euler:

$$\#caras + \#vértices = \#aristas + 2$$

encontrándose que el número de vértices del zonoedro es:

$$\#vértices = 2G(G-1) - G(G-1) + 2 = G(G-1) + 2$$

Con estas fórmulas se generaliza el problema de conocer el número de

caras, vértices, aristas y celdas elementales de un zonoedro. A continuación se presenta un tabla que resume las características de los primeros cinco zonoedros:

| G | #caras | #vértices | #aristas | #celdas | Nombre |
|---|--------|-----------|----------|---------|----------------|
| 3 | 6 | 8 | 12 | 1 | Romboedro |
| 4 | 12 | 14 | 24 | 4 | Dodecaedro R. |
| 5 | 20 | 22 | 40 | 10 | Icosaedro R. |
| 6 | 30 | 32 | 60 | 20 | Triacentaedro |
| 7 | 42 | 44 | 84 | 35 | Tetradiecaedro |

§ 3.1. Motivación del trabajo

Desde el descubrimiento de la fase I se han realizado diversos trabajos para determinar su estructura. Gracias a esto, actualmente se ha podido lograr un consenso generalizado acerca del tipo de estructura de la fase I. Esta consiste en una red cuasiperiódica obtenida por medio del método de corte y proyección o MDG utilizando como estrella vectorial un icosaedro. Sin embargo, todavía no se ha llegado a una decoración de dicha estructura que sea aceptada totalmente.

Con la fase T aún no se ha llegado este consenso, ni siquiera en la clase de estrella vectorial que deba utilizarse. El trabajo hecho sobre este tema es escaso. Hasta el momento sólo se han propuesto dos estrellas, una por Tin-Lu Ho [32] y otra por Koopmans [33] et al. . En ambos casos los autores enfocan el problema desde el punto de vista de la indicación de los patrones de difracción, más que desde un punto de vista estructural.

Esta situación, es a todas luces, insatisfactoria porque no permite estudiar a los cuasicristales desde un punto de vista más general.

Por otra parte, en el capítulo I se mencionó que el modelo dinámico de crecimiento, llamado modelo R, puede explicar de una manera natural la existencia de una estructura del tipo de la fase T. Sin embargo, para garantizar que la estructura llene todo el espacio, se necesita que la red de puntos O tenga la simetría de la fase T.

Todo esto sugiere la realización una investigación de doble propósito: estudiar las estructuras generadas por diversas estrellas de vectores, y, de aquellas que resulten más interesantes, utilizar sus correspondientes estrellas para obtener una red de puntos O.

Para llevar a cabo éste propósito, fué necesario escoger un método

matemático que sirviera para generar las estructuras cuasiperiódicas.

El método escogido fué el MDG. La razón principal de esta elección es que permite generar estructuras cuasiperiódicas con cualquier estrella vectorial [25],[26].

Además, el MDG es más general ya que genera clases e isomorfismos no obtenibles por corte y proyección.

Para aplicar el MDG a las estrellas se hicieron programas de computadora ejecutables en una máquina DIGITAL VAX11/180. Una vez obtenidas las estructuras, se realizó un estudio de sus características principales, incluyendo sus simetrías. Para completar el estudio se encontraron los patrones de difracción de las estructuras más viables para servir de modelo para las fases T.

Cabe aclarar que los patrones de difracción no deben interpretarse como un intento de reproducir los resultados experimentales, esto se debe a que en ningún caso se decoró la estructura con átomos. En cambio, los patrones deben interpretarse como un método para identificar la existencia de los elementos de simetría que aparecen en las estructuras reales.

En los cuasicristales pertenecientes a la fase T, obtenidos experimentalmente, se observa que estos crecen en forma de columnas muy alargadas, cuya sección transversal presenta patrones de difracción con simetría rotacional de orden diez.

Experimentalmente, se ha observado que perpendiculares a este eje, aparecen en los patrones de difracción dos planos espejo; es decir, la simetría de los patrones es del tipo $10/m\bar{m}$.

Para distinguir cada patrón de difracción tomado a lo largo de ciertas orientaciones en una estructura perteneciente a la fase T, se seguirá la notación de Thangaraj N. et al. [34], que le asigna los nombres siguientes:

Patron A: patrón obtenido sobre el eje de simetría rotacional diez.

Patron F: patrón obtenido al girar 90° la estructura en un eje perpendicular al de simetría diez. Se observa en este eje simetría un plano espejo. Destacan principalmente seis puntos brillantes en forma de cruz. Existe una dirección periódica y otra cuasiperiódica. Cada patrón F se repite la girar 36° la estructura usando como eje de giro al eje de simetría diez.

Patron G: patrón obtenido al girar 18° la estructura en la posición F, utilizando como eje de giro al eje de simetría de orden diez. Se observa en esta orientación un plano espejo. Los puntos de mayor intensidad forman un hexágono.

§ 3.2 Algoritmos de computo para implementar el MDG

Para aplicar el MDG se confeccionaron programas de computadora absolutamente generales; es decir, que dada cualquier estrella de vectores se pueda calcular un mosaico periódico ó cuasiperiódico, utilizando una rejilla lineal periódica o cuasiperiódica, siendo variables cada uno de los parámetros asociados al MDG (γ_1 , α_1 , B_1 , σ_1 y ρ_1).

Los programas básicos que sirvieron para este propósito son tres (aunque se hicieron dos versiones de cada programa, una tridimensional y una bidimensional). A grandes rasgos, cada programa realiza la siguiente tarea:

- 1) Calcular todos los puntos de intersección de la N-rejilla hasta cierto valor de la sucesión que aparece en 2.19; indicando las coordenadas ordinales que le corresponden respecto a las curvas o superficies que le dieron origen.

Como se vió en el capítulo 2 ,cada línea o superficie de la rejilla satisface la siguiente ecuación:

$$\langle q_1, x \rangle = x_k$$

De aquí se deduce que cada punto de intersección de la rejilla i con la j en dos dimensiones está dada por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\langle q_1, x \rangle = a_k$$

$$\langle q_j, x \rangle = b_L$$

y en tres dimensiones:

$$\langle q_1, x \rangle = a_k$$

$$\langle q_j, x \rangle = b_L$$

$$\langle q_k, x \rangle = c_H$$

que en notación matricial se escribe como:

$$M x = f$$

donde:

$$x = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} ; f = \begin{pmatrix} a_k \\ b_L \\ c_H \end{pmatrix} ; y M = \left(q_1 \ q_j \ q_k \right)$$

Este sistema puede ser resuelto de dos maneras. La primera de ellas consiste en aplicar la regla de Kramer. Mediante el uso del álgebra se encuentra que la solución del sistema es:

$$x = \frac{1}{\Delta} \left[a_k u_{1jk} + b_L u_{jkl} + c_H u_{k1j} \right]. \quad (3.1)$$

donde el vector de la forma: u_{rs1} , vale:

$$u_{rs1} = \left[q_s x q_1 \right]$$

y el determinante:

$$\Delta = \|q_r\| / \langle q_r, q_s, xq_i \rangle$$

Así, basta formar las combinaciones lineales de tres vectores para encontrar los puntos de intersección. Este resultado es importante, porque tal como se dijo en el capítulo II, el mosaico es una decoración de una N-rejilla; de donde se concluye que esta es una expresión analítica para la estructura subyacente del mosaico. Este método no es muy adecuado para usarse en una computadora porque los errores de redondeo aumentan en cada paso. La ventaja es que da una forma analítica para los puntos de intersección; lo cual es de suma utilidad ya que el mosaico es en realidad una decoración de estos puntos.

Otro método para calcular los puntos de intersecciones es utilizar el conocido algoritmo de reducción Gaussiana. Este consiste básicamente en llevar la matriz aumentada del sistema a una forma triangular, mediante operaciones elementales. Para fines de cómputo este método es más exacto, ya que los errores no se propagan, a diferencia del procedimiento basado en la expresión (3.1).

Los puntos obtenidos se escriben en un archivo, que incluye, para cada punto, las rejillas que se cruzan ahí, así como las coordenadas ordinales con respecto a la rejilla a la que pertenecen.

2) Calcular el paralelogramo dual que corresponde a cada intersección, siendo estos proporcionados por el programa 1. Este proceso se realiza del siguiente modo: dado que el programa 1 proporciona la especificación de las rejillas que se cruzan en un punto dado, la forma del paralelogramo queda bien determinada, formándose éste con los siguientes puntos:

$$0, q_1, q_j, q_k, q_1+q_j, q_1+q_k, q_j+q_k, q_1+q_j+q_k;$$

si i, j y k son las rejillas que se cruzan en el punto dado.

Sólo basta aplicarles a estos puntos una translación por el vector $P(I)$. Esto se consigue calculando las coordenadas ordinales, distintas de i, j y k , del punto de intersección (las coordenadas ordinales con respecto a i, j, k no se calculan porque son proporcionadas por el programa 1).

Para calcular las coordenadas ordinales del punto, x , se puede proceder de dos maneras. La primera de ellas sólo se puede aplicar a rejillas periódicas y tiene la ventaja de ser muy rápida. Esta manera de realizar el cálculo parte del hecho de que el producto punto:

$$\langle q_r, x \rangle / \|q_r\| \quad (3.2)$$

dá el valor de la proyección de x sobre q_r , donde q_r es un vector no necesariamente unitario:

$$\langle q_r, x \rangle / \|q_r\| = \|x\| \cos \theta(q_r, x)$$

Como en la dirección q_r las rejillas están espaciadas una distancia $T\|q_r\|$, basta tomar el entero que se obtiene al dividir (3.2) entre esta distancia para obtener la coordenada ordinal deseada:

$$K_r = \langle q_r, x \rangle / T \quad (3.3)$$

de donde:

$$P(I) = \sum_{r=1, j, k}^N \left\{ \langle q_r, x \rangle / T \right\} q_r + K_r q_1 + L_r q_j + M_r q_k$$

Cuando la rejilla es cuasiperiódica, no es posible aplicar el método anterior, aunque el procedimiento también se basa en calcular la

proyección de x sobre q_r . La diferencia estriba en que no se puede dividir entre $\|q_r\|$ para obtener la coordenada porque la rejilla contiene intervalos de longitudes diferentes. Por esto, es necesario comparar el producto punto: $\langle x, q_r \rangle$ con los términos de la sucesión a_r , previamente generada.

Así, el entero correspondiente a la coordenada ordinal, K_r , es aquel para el cual se cumple la siguiente desigualdad:

$$a_{K_r} \leq \left(\langle q_r, x \rangle / \|q_r\| \right) < a_{K_r+1}$$

Cuando se cumple la igualdad, se observa que el punto x es una singularidad, en cuyo caso se procede a removerla, moviendo los planos (o líneas) de las rejillas distintos de i, j, k para las cuales se cumpla la igualdad. En todos los casos, los planos se mueven en la dirección del vector de la rejilla correspondiente.

Al realizar el programa debe tomarse en cuenta de que en una singularidad puede suceder que el valor asignado por la computadora al término entre paréntesis de la desigualdad mencionada sea a_{K_r} , aunque en realidad el valor del término sea igual a a_{K_r+1} . La razón de esto es quedado efectos de redondeo al realizar las operaciones, el término entre paréntesis puede diferir del valor de a_{K_r+1} , no cumpliéndose entonces la igualdad. Para resolver este problema, es necesario dar un intervalo de aceptación alrededor de los términos de la sucesión a_{K_r} .

Hecho esto, se proceden a encontrar los nuevos puntos de intersección mediante un algoritmo similar al del programa 1), volviéndose a aplicar el procedimiento para calcular el dual.

3) Este programa realiza la misma función que el 2). La diferencia estriba en que no resuelve las singularidades, sino que calcula el

zonoedro correspondiente. La estructura del programa es idéntica a la del 2), hasta que se detecta una singularidad.

Entonces, se aplica un procedimiento que va recorriendo cada región con coordenadas ordinales diferentes en una vecindad del punto; aplicándole la transformación dual a algún punto arbitrario de cada región. El procedimiento consiste en muestrear la vecindad de la intersección con una estrella de vectores normalizados a un radio (ϵ). Para asegurar que efectivamente se muestrea cada intersección, los vectores de la estrella se escogen de modo particular, según las rejillas que generen la intersección. La elección en dos dimensiones es muy sencilla; primero se construyen vectores en la dirección de las líneas que se cruzan en la región; y luego se forman, por cada pareja posible de vectores, las siguientes combinaciones lineales:

$$r_1 = a_i + a_j; \quad r_2 = a_i - a_j; \quad r_3 = -a_i + a_j; \quad r_4 = -a_i - a_j$$

donde a_i y a_j son dos vectores, con la misma norma, en la dirección de las líneas de las rejillas i y j . Estos cuatro vectores, son, por construcción bisectrices de cada uno de los cuatro ángulos formados por las líneas de las rejillas i y j (ver la figura 3.1). Posteriormente, estos cuatro vectores se normalizan al radio ϵ . Formándose todas las combinaciones posibles de los vectores a_i pertenecientes a cada rejilla que cruza en el punto estudiado y repitiéndose el proceso, es posible muestrear todas las regiones.

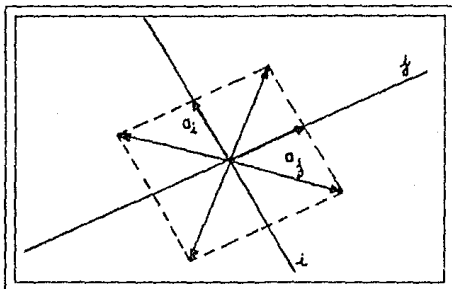
El proceso tridimensional es análogo, aunque la introducción de un grado más de libertad complica bastante la situación. El primer paso es construir, por cada terna posible de planos de las rejillas que se intersectan, tres vectores: a_i, a_j, a_k .

Estos vectores son *vectores unitarios en la dirección de cada una de las líneas formadas por la intersección de los tres planos tomados de dos en dos*, es decir, las líneas formadas por la intersección de los planos de la rejilla i con j , i con k y j con k (estos vectores se encuentran

calculando todos los posibles productos vectoriales entre los vectores q_1, q_j, q_k ; es decir: $q_1 \times q_j, q_1 \times q_k, q_j \times q_k$). Construidos estos vectores se generan las siguientes combinaciones lineales de ellos:

$$r_1 = a_1 + a_j + a_k; r_2 = a_1 + a_j - a_k; r_3 = a_1 - a_j + a_k; r_4 = a_1 - a_j - a_k;$$

$$r_5 = -a_1 + a_j + a_k; r_6 = -a_1 + a_j - a_k; r_7 = -a_1 - a_j + a_k; r_8 = -a_1 - a_j - a_k;$$



(fig 3.1 .Construcción de cuatro vectores que bisectan las cuatro regiones de la vecindad de una intersección)

Estos vectores se normalizan después al radio c ; y por construcción son vectores que están contenidos en cada una de las ocho regiones que se encuentran en la vecindad del punto. El radio c debe ser tal que no contenga dentro de la esfera definida por él, otros puntos de intersección. Para ello se utilizó un programa que indica la separación mínima entre un conjunto de puntos de intersección proporcionados por el programa 1); así, basta tomar a c más pequeño. Esto último no es estrictamente válido para rejillas periódicas; en ellas pueden encontrarse puntos arbitrariamente cercanos [26] (como en la pentarejilla periódica). Sin embargo, esto sucede para puntos situados muy lejos del origen (en el caso de las rejillas que se utilizaron), por lo cual esta situación no representa ningún problema.

Este método es muy general permitiendo encontrar el zonoedro dual de cualquier punto de intersección singular.

§ 3.3 Parámetros del MDG

Como se vió en el capítulo II, el MDG tiene varios parámetros. Además, se pueden formar varios tipos de N-rejillas dada una estrella vectorial. Por esto, es necesario dar algunos criterios que permitan seleccionar adecuadamente el tipo de N-rejilla y los parámetros a utilizar. Para el trabajo presente se decidió utilizar dos tipos de N-rejilla por cada estructura: una *N-rejilla lineal periódica* y una *N-rejilla de Fibonacci*. La razón de escoger ambos tipos es que representan las dos variantes principales del MDG: N-rejillas periódicas y cuasiperiódicas. Se escogió la rejilla de Fibonacci porque aparece de manera natural el parámetro τ , el cual se encuentra en los patrones de difracción experimentales [34].

Al trabajar con la N-rejilla lineal periódica se necesitan dar los parámetros γ para cada una de las N-rejillas, además de darse T.

Como el parámetro T corresponde a un reescalamiento de la N-rejilla, ya que determina la separación entre planos, se observa que su valor no afecta el tamaño del mosaico dual; por lo cual puede escogerse igual a uno. La selección de cada γ_N no es tan sencilla. Sin embargo, se observa que la máxima simetría rotacional que tiene en la N-rejilla es cuando todas las γ_i son iguales; siendo esta la razón de que se hayan escogido todas las γ_i iguales. Así, el problema se simplifica a darle un valor al parámetro que representa a los N parámetros γ .

Finalmente, como el caso excepcionalmente singular es el de máxima simetría, se le ha escogido para generar estructuras con las estrellas dadas. Así, para N-rejillas lineales periódicas se han escogido los siguientes valores de los parámetros:

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \dots = \gamma_N = 0; \text{ y } T=1$$

Para las N-rejillas cuasiperiódicas, se escogieron los parámetros de modo que se tuviera una N-rejilla de Fibonacci, con la mayor simetría posible:

$$\beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_N = 0; \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_N = 0; \quad \sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_N = \tau; \quad \rho_1 = \rho_2 = \dots = \rho_N = \tau$$

y $T=1$.

§ 3.3.1 Elección de las estrellas vectoriales

Las estrellas que fueron escogidas para aplicarles el MDG, aparecen en la figura 3.2. En dicha figura se observan las dimensiones de cada estrella, apareciendo a la izquierda de cada una, su correspondiente vista en perspectiva. Se observa que todas contienen vectores que definen anillos con forma de pentágono en algún plano paralelo al eje de simetría cinco, al cual se le llamará de aquí en adelante z.

Estas estrellas fueron escogidas de acuerdo a dos criterios principales: en primer lugar se consideraron estrellas derivadas de las semilla propuesta por el modelo R (estrellas: a), c), d), f)). Estas se obtienen aplicándole una translación a la semilla básica. La idea fué ver que efectos tenía en la estructura el realizar dichas translaciones, porque aunque la semilla que dá lugar a una estructura del tipo fase T por crecimiento decaedraal está determinada, esta no necesariamente tendrá que coincidir con la estrella vectorial que dé lugar a la estructura formada por puntos O. En segundo lugar se consideraron aquellas estrellas propuestas por la literatura; estas estrellas son la h) (propuesta por Tin-Lu Ho [32]), la g) (propuesta por Koopmans et al. [33]).

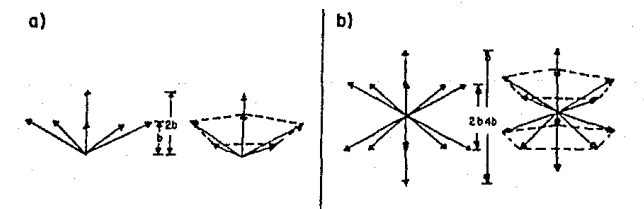
Las estrellas derivadas del modelo R tienen una característica común: contienen siempre los seis vectores de un icosaédro, pero a diferencia de éste, el vector situado a lo largo del eje de simetría rotacional cinco se encuentra ligeramente comprimido, de modo que su norma sea igual a la proyección de los vectores restantes del icosaedro sobre el eje de

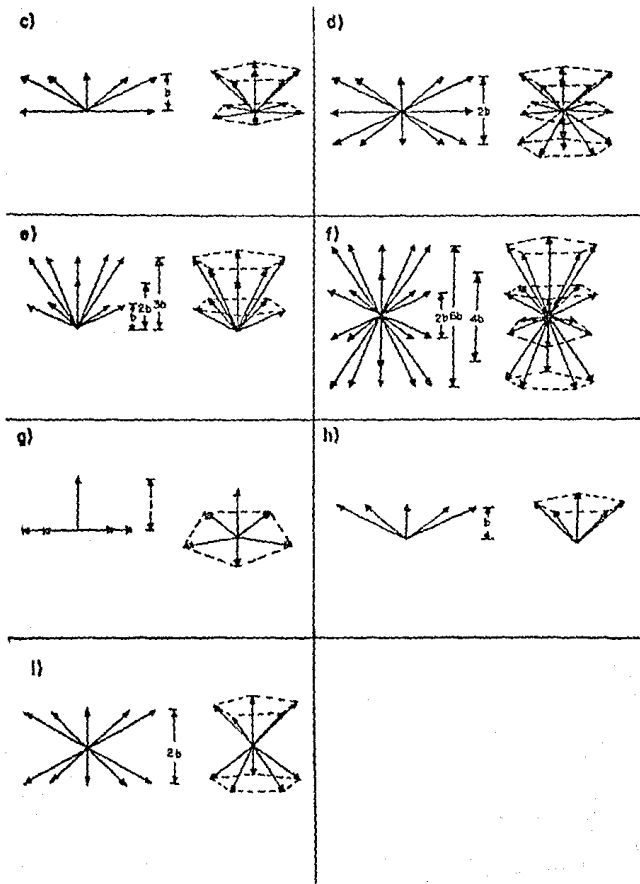
simetría cinco. La compresión mencionada permite que la estructura sea conmensurada sobre el eje z .

El segundo criterio aplicado se deriva del hecho de que la fase T presenta un plano espejo perpendicular al eje de simetría diez. Por ello, se decidió incluir esta simetría en la estrella misma, aplicándole a cada estrella una reflexión por el eje $z=0$.

Así, junto a cada estrella de las mencionadas aparece una estrella similar, con la diferencia de que a cada una de éstas se les aplicó una reflexión por el plano espejo $z=0$; exceptuando un caso, el de la estrella de Koopmans.

La razón de esto es que dada la forma de la estrella (un anillo pentagonal en $z=0$ y un vector de norma uno sobre el eje z), el resultado neto será que el vector sobre el eje z queda invertido, pero como la rejilla se construye considerando índices negativos y positivos de planos, siempre existirá un gemelo especular por cada plano de la rejilla. Esta estrella es muy interesante; desde un principio puede esperarse que el MDG genere una estructura formada por mosaicos de Penrose apilados unos sobre otros. Esto se debe a que los cinco vectores en el plano generan un mosaico de Penrose, tal como se estudió en el capítulo II, mientras que la función del vector sobre el eje z consiste en levantar los vértices del plano $z=0$.





(fig. 3.2. Estrellas estudiadas. Las estrellas a), c), e) se derivan de las estrellas propuestas por D. Romeu [24]; b), d), f) se obtienen al aplicar un plano espejo a a), c) y e) respectivamente. h) y i) son las estrellas propuestas por Tin-Lu Ho [32]; y la g) por Koopmans [33]).

§ 3.4 Resultados

Esta sección se divide en tres partes; en las dos primeras se presentan los resultados obtenidos al aplicar los programas mencionados previamente a diversas estrellas bi y tridimensionales; variando los parámetros del MDG. El objetivo de estas secciones es mostrar la generalidad del método, así como reproducir algunas de las estructuras que frecuentemente aparecen en la literatura.

En la tercera parte aparecen los resultados del estudio realizado sobre estructuras que pudieran servir para modelos de la fase T.

§ 3.4.1 Mosaicos bidimensionales

Al utilizar los programas se reprodujeron algunos de los mosaicos que comunmente aparecen en la literatura; otros mosaicos fueron calculados partiendo de estrellas de vectores y parámetros arbitrarios. De hecho, estos mosaicos han servido a lo largo de la presente tesis como ilustraciones; por esto, a manera de resumen se muestra a continuación una lista de los mosaicos calculados. En este resumen se especifican todos los parámetros de estos, así como el número de la figura correspondiente, referida al texto.

Estrella pentagonal, rejilla periódica, $\gamma_1=0 \quad \forall \quad i=0,\dots,5$ (Caso excepcionalmente singular ; T=1. En este mosaico se han removido las singularidades). Figura: 1.2., pág. 11.

Estrella pentagonal, rejilla periódica, $\gamma_1=0 \quad \forall \quad i=0,\dots,5$ (Caso excepcionalmente singular) ; T=1. La diferencia con el mosaico anterior consiste en que aquí se muestran los zonoedros sin decoración. Figura: 2.12 , pág. 51.

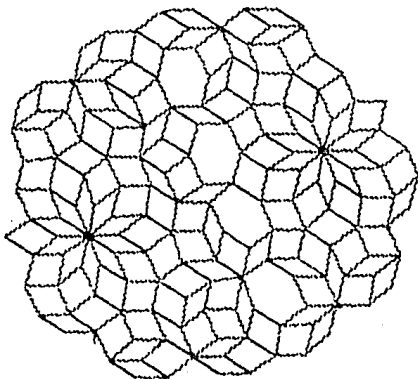
Estrella pentagonal, rejilla periódica. $\gamma_i=1/2 \forall i=0,\dots,5$. $T=1$.
Figura: 2.9 a), pág.46.

Estrella pentagonal, rejilla cuasiperiódica (pentarejilla de Fibonacci), $\alpha_i=\beta_i=0 \forall i=0,\dots,5$; $T=1$. $\sigma_i=\rho_i=\tau \forall i=0,\dots,5$.
Figura: 2.9 b), pág.46.

Estrella pentagonal, rejilla cuasiperiódica. $\alpha_i=0$, $\beta_i=1/2$, $\rho_i=2^{-5/2}$,
 $\sigma_i=3^{3/2}$; $\forall i=0,\dots,5$. Figura: 2.9 c), pág. 47.

Estrella nonagonal, rejilla periódica. $\gamma_i=0 \forall i=0,\dots,8$. $T=1$. Figura:
2.10 d), pág. 47.

Como complemento, en la figura 3.3 a) aparece: un mosaico derivado de una pentarejilla periódica con parámetros: $\gamma_0=\gamma_1=\gamma_2=\gamma_3=1/2$; $\gamma_4=\gamma_5=0$.



(fig. 3.3 a))

§ 3.4.2 Mosaicos tridimensionales y la estrella icosaedra.

En esta sección también se referirá a las ilustraciones del texto. Dichas ilustraciones han correspondido a mosaicos tridimensionales

obtenidos a partir de una estrella icosaedra, la cual, como se mencionó en el capítulo I, ha servido para modelar la fase I. Los resultados que se han incluido son:

Zonoedros que aparecen en el mosaico de Penrose tridimensional:

-Dodecaedro rómbico

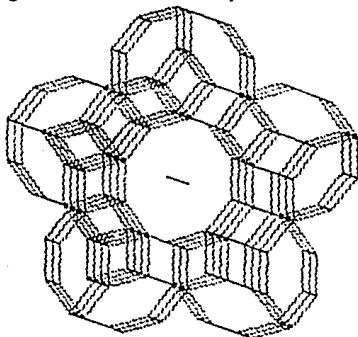
-Icosaedro rómbico

-Triacontaedro

(estos poliedros corresponden a las figuras 2.15 a), b) y c) respectivamente, pág. 56).

Mosaico de Penrose tridimensional, rejilla periódica, $\gamma_i=0 \forall i=0, \dots, 6$ (Estrella icosaedra). Este mosaico es análogo al obtenido independientemente por J.L. Aragón usando el método de corte y proyección. Figura: 2.14, pág. 56.

Como complemento se presenta un mosaico tridimensional (sólo los zonoedros), correspondiente a una rejilla de Fibonacci (fig. 3.4). La estrella usada para calcular este mosaico no fué un icosaedro, sino un pentágono sobre un plano ($z=0$) mas un vector perpendicular. Nótese que el mosaico consiste en un apilamiento de mosaicos tridimensionales (la comparación puede efectuarse con el mosaico en 2D de la figura, en el cual aparece el análogo bidimensional sólo que con decoración)



(fig. 3.4. Mosaico tridimensional)

§ 3.4.3 Estudio de la fase T

En esta sección se presentan los resultados obtenidos. La forma en que estos se presentan es la siguiente: primero se da una descripción de la estrella, cuyo dibujo aparece, con la numeración correspondiente, en la figura 3.2, pág. 74. Luego se presenta una breve descripción de las estructuras obtenidas, así como las simetrías observadas; dependiendo del tipo de la N-rejilla. Dado que las N-rejillas periódicas han sido las que contienen las simetrías más adecuadas para la fase T, según se podrá ver, se incluyen también los patrones de difracción en las orientaciones A, F y G (figura 3.5).

a) Estrella: un anillo pentagonal, en el plano $z=b$, y un vector de largo $2b$ sobre el eje z .

Estructura

Rejilla periódica:

- La estructura tiene un centro de inversión con coordenadas: $(0,0,-1.57)$.
- No tiene planos espejo perpendiculares al eje z .
- Está formada por pisos perpendiculares al eje z y separados sobre este mismo eje una distancia b . Cada piso tiene un gemelo girado 72° , situado en el piso $(-z-1.75)$, (donde z es la altura del piso); debido al centro de inversión.
- La estructura no es periódica a lo largo del eje z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene planos espejo sobre z .
- No tiene centro de inversión.
- Se forma por pisos perpendiculares a z y separados por una distancia b sobre z .
- Cada piso tiene simetría rotacional pentagonal.
- Los pisos se acomodan por parejas iguales, aunque una está girada 72° respecto a la otra.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

b) Estrella: Estrella obtenida al reflejar la estrella a) por el plano espejo $z=0$.

Estructura

Rejilla periódica:

- No hay centro de inversión
- Tiene un plano espejo en $z=0$.
- Se forma con pisos perpendiculares al eje z separados una distancia b .
- En los pisos $z=0$ y $z=\pm 0.95$ aparecen decágonos.
- Cada piso es diferente (exceptuando los pisos obtenibles por reflexión).
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No hay centro de inversión
- Hay un plano espejo en $z=0$.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z , separados una distancia b .
- Sobre el eje z aparecen decágonos.
- En algunos pisos aparecen pentágonos.
- Aparecen pentágonos, de diferentes tamaños, con la misma orientación, en cada piso.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

c) Estrella: un anillo con forma de pentágono cuya coordenada z vale 0; un anillo pentagonal en $z=b$, y un vector sobre el eje z de largo b .

Estructura

Rejilla periódica:

- Tiene un centro de inversión en $(0,0,-1.35)$.
- Carece de plano espejo.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z , separados una distancia b .

- Cada piso tiene simetría rotacional pentagonal.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene centro de inversión.
- No tiene plano espejo.
- La estructura se forma por pisos perpendiculares a z , separados una distancia b .
- Cada piso tiene simetría pentagonal.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

d) Estrella: Es obtenida al reflejar en el plano espejo $z=0$, la estrella c).

Estructura

Rejilla periódica:

- Tiene centro de inversión en $(0,0,-4.94)$.
- Tiene un plano espejo en $z=0$.
- Se forma por pisos perpendiculares a el eje z , separados una distancia b .
- En el plano $z=0$, así como en los $z=\pm b$, $z=\pm 2b$ aparecen decágonos.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene centro de inversión.
- tiene un plano espejo en $z=0$.
- Se forma por pisos separados una distancia b .
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

e) Estrella : un anillo pentagonal con coordenada sobre el eje z , $z=3b$. Un anillo pentagonal en $z=b$, y un vector sobre el eje z de largo $2b$.

Estructura

Rejilla periódica:

- No tiene plano espejo.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z , separados una distancia b .
- Cada piso tiene simetría pentagonal.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene centro de inversión
- No tiene plano espejo
- Se forma con pisos perpendiculares al eje z , separados una distancia b .
- Cada piso es diferente a los otros.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

f) Estrella: Estrella obtenida al reflejar a la estrella e), por medio del plano espejo $z=0$.

Estructura

Rejilla periódica:

- Tiene centro de inversión en $(0,0,0)$.
- No tiene plano espejo
- La estructura se forma por pisos sobre z , separados una distancia b .
- En el plano $z=0$, aparecen dos decaedros, girados entre sí 18° .
- Algunos pisos tienen simetría pentagonal.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- La estructura es idéntica a la obtenida con la rejilla periódica.

g) Estrella: un anillo pentagonal sobre el plano $z=0$; y un vector sobre el eje z de largo 1.

Estructura

Rejilla periódica:

- Tiene un centro de inversión en el punto $(0,0,0)$
- Tiene plano espejo, a saber $z=0$.
- Toda la estructura se forma por pisos separados una distancia 1 .
- Cada piso corresponde a un mosaico de Penrose singular.
- La estructura es periódica a lo largo del eje z .

Rejilla cuasiperiódica:

- Tiene un centro de inversión en $(0,0,0)$.
 - Se forma con pisos perpendiculares al eje z ; separados una distancia 1 .
 - Cada piso es un mosaico de Penrose.
 - La estructura es periódica a lo largo del eje z .
- h) Estrella: un anillo pentagonal en el plano $z=b$.

Estructura

Rejilla periódica

- Tiene un centro de inversión en el punto $(0,0,0)$.
- No tiene planos espejo.
- La estructura se forma con pisos separados una distancia $2b$.
- Cada piso tiene simetría pentagonal.
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene centro de inversión
- No tiene planos espejos.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z separados una distancia b .
- La estructura no es periódica a lo largo de z .

- 1) Estrella: esta estrella se obtiene por una reflexión de la estrella h).

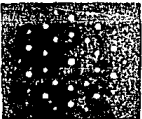
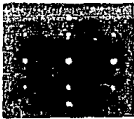
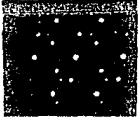
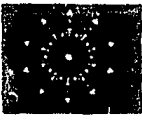





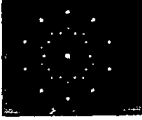


Estructura

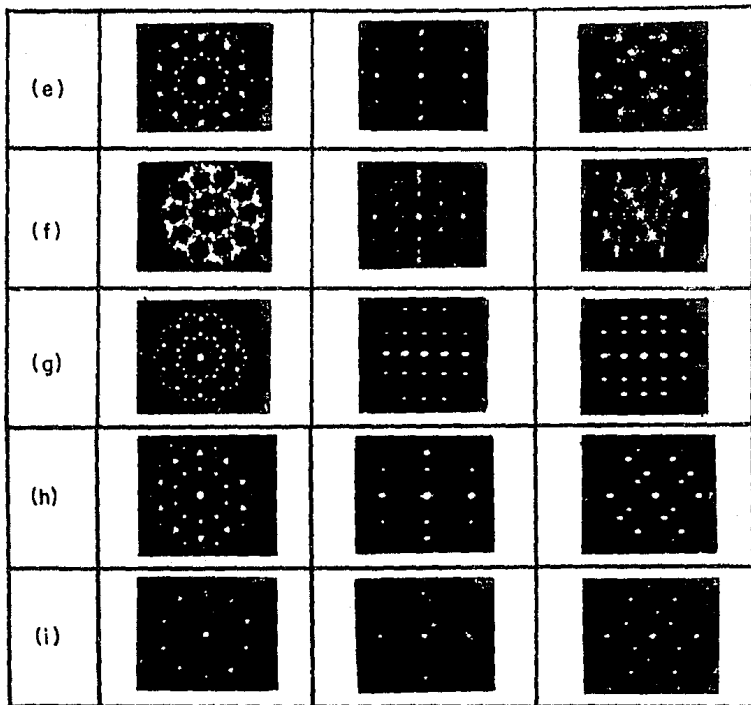
Rejilla periódica:

- No tiene centro de inversión
- No tiene plano espejo.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z, separados una distancia b .
- La estructura no es periódica a lo largo de z.

Rejilla cuasiperiódica:

- No tiene centro de inversión
- No tiene plano espejo.
- Se forma por pisos perpendiculares al eje z, separados una distancia b
- La estructura no es periódica a lo largo de z.

| | A | F | G |
|-----|---|---|---|
| (a) |  |  |  |
| (b) |  |  |  |
| (c) |  |  |  |
| (d) |  |  |  |



(fig. 3.5. Patrones de difracción obtenidos)

CAPITULO IV

§ 4.1 Discusión

Para llevar a cabo una selección de las estrellas que sirvan para modelar la fase T, es necesario estudiar las simetrías contenidas en las estructuras obtenidas a partir de ellas. Algunas de ellas, tales como las simetrías rotacionales pueden ser encontradas de los patrones de difracción A, G y F.

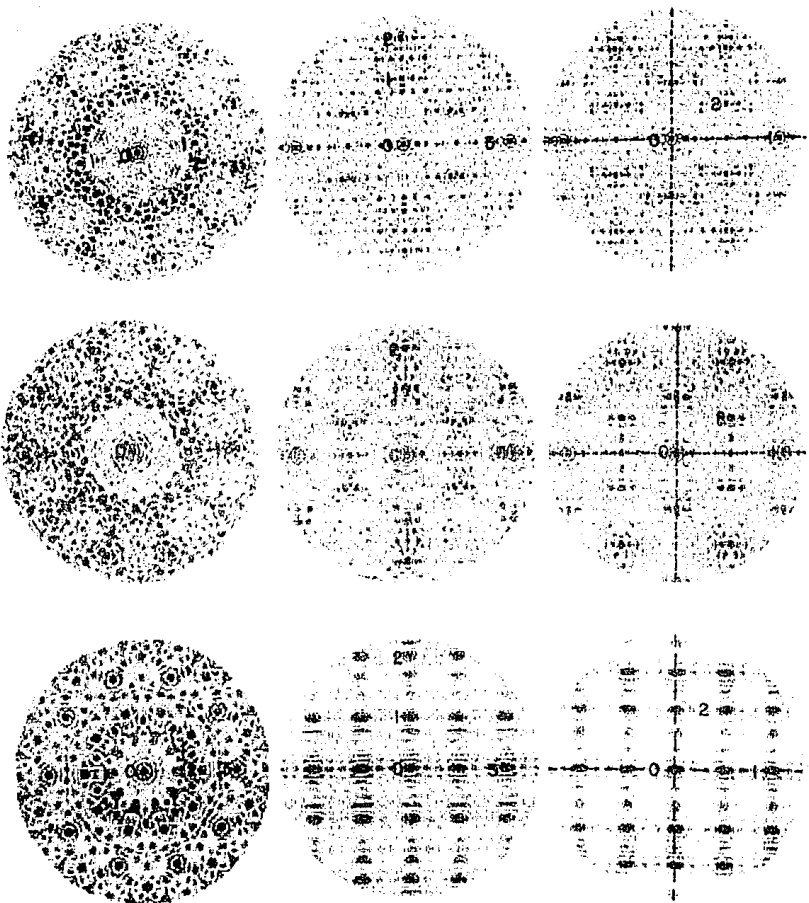
Para determinar si las estructuras contenían centros de inversión o planos espejo se recurrió a una análisis directo de la estructura; es decir, se verificó si cada estructura era congruente consigo misma al aplicársele una inversión o una reflexión.

Primero se analizarán las estructuras obtenidas a partir de rejillas periódicas, recurriendo para este fin a los patrones de difracción.

En la posición G, los resultados experimentales muestran que los puntos de mayor intensidad forman un hexágono; el cual posee como elementos de simetría, dos planos espejos perpendiculares entre sí. Observando todos los patrones G presentados en esta tesis, se concluye que sólo los correspondientes a las estrellas b), d) y g) contienen dichos planos (en la figura 4.1 se exhibe un patrón G típico, señalándose en él los dos planos espejos). En la estructura perteneciente a la estrella g), existen varios puntos de la misma intensidad que los pertenecientes al mencionado hexágono; sin embargo el patrón de difracción correspondiente todavía contiene las simetrías adecuadas de las fases T.

Las posiciones F y G contienen las mismas simetrías para todos los patrones obtenidos, variando de un patrón a otro la intensidad de los puntos. Sin embargo, el mero estudio del patrón G permite discriminar las estrellas a utilizar.

Dado que estas estrellas son las más significativas, se incluyen aquí



(fig. 4.1. Patrones de difracción b), d) y g), donde se señalan los planos espejo y los parámetros que se mencionan en el texto.)

los valores de algunos parámetros que son comunes a los tres patrones en las posiciones A, G y F. Estos parámetros corresponden a la distancia en Ångstroms recíprocos entre el origen y los puntos de mayor intensidad. Es necesario aclarar que los patrones G y F correspondientes a la estrella g) contienen puntos muy anchos, a diferencia del patrón A. Esto se debe a que la estrella g) tiende a crecer mucho más sobre cada plano perpendicular al eje z que a lo largo del eje z; por esto, la estructura es mucho menos extensa a lo largo de dicho eje, por esta razón se presenta un ensanchamiento de los picos de difracción por el tamaño finito de la estructura difractada (el ensanchamiento de los picos debido a este efecto es de 0.04Å^{-1}).

Estos parámetros se han obtenido bajo la suposición de que en cada vértice de las estructuras se encuentra un átomo de Aluminio; para lograr esto, las estructuras se reescalaban por un factor de 2.31Å; de modo que la distancia entre los átomos de Aluminio fuera 2.86Å.

La numeración con la cual se ha identificado cada punto intenso en las posiciones A, G y F puede verse en la figura 4.1; todas las distancias que se presentan están en Ångstroms recíprocos; también se incluyen las razones entre los parámetros (estas razones fueron calculadas midiendo la distancia en pixeles de los puntos de mayor intensidad; es decir, no fueron obtenidas dividiendo entre sí los parámetros en Ångstroms recíprocos).

PATRONES DEL TIPO A

| Estrellas | 01 | 02 | 03 | 03/01 | 02/01 | 03/02 |
|-----------|------|------|------|-------|-------|-------|
| b) | 0.50 | 0.60 | 0.95 | 1.93 | 1.20 | 1.60 |
| d) | 0.50 | 0.60 | 0.95 | 1.93 | 1.20 | 1.60 |
| g) | 0.46 | 0.53 | 0.87 | 1.89 | 1.16 | 1.63 |

PATRONES DEL TIPO F

| Estrellas | 01 | 02 | 03 | 03/01 | 02/01 | 03/02 |
|-----------|------|------|------|-------|-------|-------|
| b) | 0.61 | 0.97 | 0.97 | 1.61 | 1.61 | 1.00 |
| d) | 0.61 | 0.97 | 0.97 | 1.61 | 1.61 | 1.00 |
| g) | 0.53 | 0.85 | 0.85 | 1.61 | 1.61 | 1.00 |

PATRONES DEL TIPO G

| Estrellas | 01 | 02 | 01/02 |
|-----------|------|------|-------|
| b) | 0.97 | 0.58 | 1.71 |
| d) | 0.97 | 0.58 | 1.71 |
| g) | 0.97 | 0.58 | 1.71 |

(Nótese que $\tau=1.618\dots$)

Algo importante que hay que anotar es que , para el caso de mosaicos tridimensionales obtenidos a partir de rejillas singulares periódicas, usando estrellas de vectores que no contenian por construcción un plano espejo, todas las estructuras presentan un centro de inversión; no conteniendo planos espejo.

Así, de las estrellas analizadas, prevalecen las b), d) y g). Las estrellas b) y d) contienen por construcción un plano espejo.

Los patrones de difracción que se han mostrado hasta aquí son cinemáticos, sin embargo, cabe la posibilidad de que se presenten en los patrones experimentales efectos de doble difracción.

Para mostrar el efecto de la doble difracción, se incluyen aquí los patrones de difracción dinámicos en las posiciones F y G, correspondientes

a la estrella d) (fig. 4.2). Al comparar estos patrones con los cinemáticos, se observa que aparecen nuevos puntos, además de que la intensidad de cada pico se modifica. Estos patrones de la fase T se parecen mucho a los reportados por Fung et al. [36], obtenidos a partir de una aleación de Al-Fe. Para comparar, se presentan aquí algunos de los resultados obtenidos experimentalmente por Fung et al..

Las tablas siguientes contienen las relaciones entre las posiciones de los picos más intensos; la numeración de cada pico es similar a la dada para las tablas precedentes. Estas relaciones fueron medidas sobre los patrones reportados por Fung et. al.[36]. Las distancias en Ångstroms recíprocos no se incluyen, ya que en dicho trabajo no se menciona la escala de los patrones

Patrón A

| | | |
|-------|-------|-------|
| 03/01 | 02/01 | 03/02 |
| 1.9 | 1.2 | 1.6 |

Patrón F

| | | |
|-------|-------|-------|
| 03/01 | 03/02 | 02/01 |
| 1.6 | 1.0 | 1.6 |

Patrón G

| |
|-------|
| 01/02 |
| 1.8 |

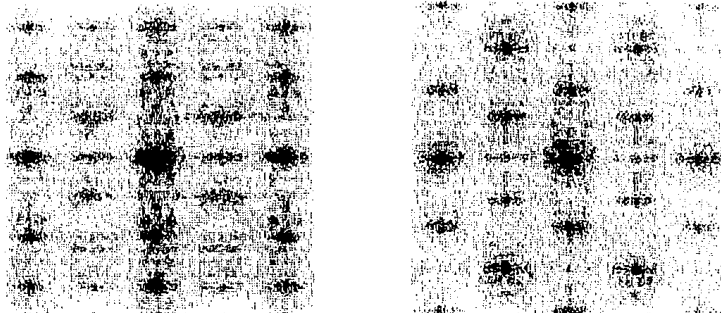
(El error máximo en estas medidas es de 4.5%)

Se observa que estos cocientes corresponden a los obtenidos para las estrellas b), d) y g), dentro de los límites de la precisión.

En el trabajo de Fung. et. al. [35] se menciona que los patrones de la

fase T pueden obtenerse al reflejar, por medio de una plano espejo perpendicular al eje de simetría diez, una estructura del tipo de la fase icosaedraal. Siguiendo esta idea, se reflejó la estructura obtenida de la estrella a) utilizando el plano $z=0$. Como resultado se obtuvo un patrón similar al de la estructura obtenida de la estrella b).

Con rejillas cuasiperiódicas, y para los parámetros escogidos, sólo las estructuras obtenidas con las estrellas b) y d) tuvieron un plano espejo. Las restantes no tuvieron ni plano espejo ni centro de inversión.



(fig. 4.2 Patrón de difracción dinámico de los patrones F y G correspondientes a la estrella d)

Cabe decir, que la forma de la sucesión escogida no favorece las simetrías en torno del origen; en una rejilla dada y cerca del origen, los planos se encuentran a las siguientes distancias del origen (medidas sobre

el vector q_1) :

$$j=1 \longrightarrow x_N = 1 + \frac{1}{\tau} \left[\left(\frac{1}{\tau} \right) \right] = 1$$

$$j=0 \longrightarrow x_N = 0 + \frac{1}{\tau} \left[\left(\frac{0}{\tau} \right) \right] = 0$$

$$j=-1 \longrightarrow x_N = -1 + \frac{1}{\tau} \left[\left(\frac{-1}{\tau} \right) \right] = -1 - \frac{1}{\tau}.$$

Para futuros estudios, convendría trabajar con rejillas cuasiperiódicas simétricas respecto al cero.

§ 4.2 Conclusiones

En el presente trabajo se ha utilizado el MDG para calcular, utilizando una computadora, estructuras cuasiperiódicas partiendo de diversas estrellas de vectores. También se han expuesto los algoritmos computacionales que resultan convenientes de adoptar para usar el MDG; con estos algoritmos se reprodujeron la mayoría de los resultados que se reportan en la literatura. Además, se desarrollaron fórmulas para estudiar las configuraciones de los zonoedros que aparecen en las N -rejillas singulares.

De las estrellas estudiadas, las más adecuadas para formular un modelo de la fase, según este trabajo son:

- Un pentágono (cuyos radiovectores tienen norma uno), sobre el plano $z=0$.
El vector de coordenadas: $(0,0,1)$

- Un pentágono sobre el plano $z=0$.
Dos pentágonos sobre los planos $z=\pm b$.
(Ambos con radiovectores unitarios)
Dos vectores a lo largo del eje z : $(0,0,\pm b)$

- Dos pentágonos sobre el plano $z=\pm b$
(Ambos con radiovectores unitarios)
Dos vectores a lo largo del eje z : $(0,0,\pm b)$.

Los patrones de difracción correspondientes a las estructuras generadas con estas estrellas contienen los elementos de simetría que presentan los patrones experimentales. La estructura generada a partir de la segunda estrella reproduce algunas características cualitativas de los patrones experimentales de Al-Fe.

El método empleado en este trabajo (GDM), resulta ser una herramienta analítica muy inmediata para generar estructuras cuasiperiódicas. Sin

embargo, por su sola utilización no es posible obtener un modelo atomístico de las fases T. Para ello se requiere de otras consideraciones que permitan encontrar las posiciones de los átomos en la red.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] SHECHTMAN, D., BLECH, D., GRATIAS, D., CAHN, J.W., "Metallic Phase with Long-Ranged Orientational Order and No Translational Symmetry", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 53, Núm. 20, Nov., (1984), 1951-1953.
- [2] BEISER, A., Conceptos de física moderna; 2a ed., México, Ed. McGraw-Hill, 1985, 469 pp.
- [2] RODRIGUEZ, J., Fundamentos de cristalografía física; Washington, Ed. U.N.E.S.C.O., 1986, 82 pp., serie de física, monografía no. 15.
- [4] BRUNNS, W., RAMDOHR, P., Cristalografía; 5a ed., México, Ed. U.T.E.H.A., 1965, 127 pp., Manuales U.T.E.H.A no. 136.
- [5] BRAUNS, R., CHUDOBA, K., Mineralogía General; 10a ed., México, Ed. U.T.E.H.A., 1961, 158 pp., Manuales U.T.E.H.A. no. 38.
- [6] BUERGER, M.J., Elementary Crystallography; New York, Ed. John Wiley, 1956, 528 pp.
- [7] NELSON, D., "Quasicristales"; *Investigación y Ciencia*, Núm. 121, Oct., (1986), 24-35.
- [8] STEINDHARDT, P., OSTLUND, S., The Physics Of Quasicrystals; Singapur, Ed. World Scientific Publishing Co., 1987, 739 pp.
- [9] JARIC, M.V., "Diffraction from Quasicrystals: Geometric Structure Factor"; *Phys. Rev. Lett. B.*, Vol. 34, Núm. 7, Oct., (1986), 4685-4698.
- [11] JANSSEN, T., "Aperiodic crystals: a contradictio in terminis?"; *Phys. Reports*, Vol. 168, Núm. 2, (1988), 55-113.
- [12] BENDERSKY, L., "Quasicrystal with One-dimensional Translational Symmetry and a Ten-fold rotation Axis"; *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 55, Núm. 14, Sept., (1985), 1461-1463.
- [13] ISHIMASA, T., NISSEN, H.J., FUKANO, Y., "New Ordered State Between Crystalline and Aorphous in Ni-Cr Particles"; *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 55, Jul, (1985), 511-513.
- [14] LEVINE, D., STEINDHARDT, P., "Quasicrystals: a new class of ordered structure", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 53, Núm. 26, Dec., (1984), 2477.
- [15] GRATIAS, D., "Los quasicristales"; *Mundo Científico*, Vol. 6, Núm. 61, (1986), 878-895.

- [16] PAULING, L., "So-called Icosaedral and Decagonal Quasicrystals are Twins of an 820-atom Cubic Crystal"; Proc. Natl. Acad. Sci., USA, Vol.84, Jun.,(1987), 3951-3953.
- [17] MACKAY,A.L., "De Nive Quinquangula: On the Pentagonal Penrose"; Sov. Phys. Cryst., Núm. 26, (1981), 517-522.
- [18] SPIVAK,M., Cálculo; 2a. ed.,Barcelona, Ed. Reverté, 1986, 841 pp.
- [19] MACKAY,A.L., "Crystallography and the Penrose Pattern"; Physica A, North-Holland,Vol. 114, (1982),609-613.
- [20] STEPHENS,P.W., GOLDMAN,A.I., " Sharp Diffraction from an Icosaedral Glass"; Phys. Rev. Lett,Vol.56,Núm.11, Mar.,(1986), 1168-1171.
- [21] HORN,P.,MALZFELT W., DIVICENZO D., TONER J., GAMBINO R., "Systematics of Disorder in Quasiperiodic Materials"; Phys. Rev. Lett., Vol.57, Núm.12, Sept. (1986),1444-1447.
- [22] ROMEU,D., "Quasicrystals,Crystals and Multiply Twinned Particles, a Unified Growth Model", Acta Met., (en prensa).
- [23] ROMEU,D., "Atomic Structure of the Icosaedral Phase"; International Journal of Modern Physics Lett. B.,Vol. 2,(1988),77-86.
- [24] ROMEU,D., "Structural Properties of Icosaedral and Decagonal Phases"; Materials Science Forum, Vols. 33-34,(1984),257-268.
- [25] ARAGON,J.L., "Un Algoritmo General para obtener Estructuras No Periódicas por el Método de la Banda"; México, Fac. de Ciencias (U.N.A.M.), (1988), Tesis de maestría.
- [26] LEVINE,D., STEINDHARDT,P., "Quasicrystals I: Definition and Structure"; Phy. Rev. Lett. B,Vol. 34,Núm. 2, Jul.,(1986), 596-616.
- [27] ELSER,V.,"The Diffraction Pattern of Projection Structures"; Acta. Cryst. A,Vol. 32,(1986),36-43.
- [28] DE BRUIJN,N.G., " Algebraic Theory of Penrose's non periodic tilings of the plane"; Proceedings Math. Gen. A., Vol. 84(1), Mar.,(1981),39-52.
- [29] LEVINE,D., STEINDHARDT,P., " Quasicrystals II: unit cell configurations", Phys. Rev. Lett. B,Vol. 34,Núm. 2, Jul.,(1986),617-647.
- [30] SOCOLAR,E.S., STEINDHARDT,P.J., LEVINE,D.; "Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry";Phys. Rev. Lett.B,Vol. 32,

Núm. 43, 53-57, (1985).

- [31] GÄHLER, F., RHYNER, J., "Equivalence of the generalised grid and projection methods for the construction of quasiperiodic tilings"; *Jou. Phys. A*; Vol. 19, (1986), 267-277.
- [32] HO, T.L., "Periodic Quasicrystal"; *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 56, Núm. 5, Feb., (1986), 486-470.
- [33] KOOPMANS, B., SCHURER, P.J., VAN DER WOUDE, F., "X-Ray Diffraction and Mössbauer-Effect Study of the Decagonal $Al_7(Mn_{1-x}Fe_x)_2$ alloy"; *Phys. Rev. Lett. B*, Vol. 35, Feb., (1987), 3005-3008.
- [34] THANGARAJ, N., SUBBANNA, G.N., RANGANATHAN, S., CHATTOPADHYAY, N., "Electron Microscopy and Diffraction of Icosaedral and Decagonal Quasicrystals in Aluminium-Manganese alloy"; *Jou. of Microscopy*, Vol. 146, Jun., (1987), 287-302.
- [35] FUNG, K.K., "Icosahedrally Related Decagonal Quasicrystal in Rapidly Colled Al-14 at. %-Fe Alloy"; *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 56, Núm. 19, May., (1986), 2060-2063.