



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
Doctorado en Ciencias(Física)

PERIODIZANODO LOS CUASICRISTALES:
DINÁMICA EN UN GAS DE LORENTZ
CUASIPERIÓDICO

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS(FÍSICA)

PRESENTA:
RICARDO ATAHUALPA SOLÓRZANO KRAEMER

TUTOR O TUTORES PRINCIPALES
DR. DAVID PHILIP SANDERS
FACULTAD DE CIENCIAS

EN SU CASO, MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DR. VÍCTOR MANUEL ROMERO ROCHÍN
INSTITUTO DE FÍSICA
DR. KARO MICHAELIAN
INSTITUTO DE FÍSICA

MÉXICO, D. F. (FEBRERO) 2014



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 esta 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.

*A mi madre
quien siempre ha creído en mí*

Agradecimientos

Durante la realización de esta investigación, hubo un gran número de personas que me apoyaron, sin las cuales hubiera sido imposible o al menos muchas veces más difícil realizar este trabajo. Sin duda alguna, una de las personas que más me apoyó fue mi tutor y amigo David P. Sanders, quien no sólo me apoyó en un nivel académico, sino que también me dio motivación para continuar durante los momentos difíciles y me apoyó siempre en mi desarrollo personal y laboral. Por esta razón creo que debe tener una mención especial en este apartado.

También quisiera agradecer a mi tutor Victor Romero, quien siempre tuvo tiempo de escuchar mis planteamientos y con quien tuve fructuosas discusiones. De igual forma a Karo Michaelian quien me hizo comentarios acertados durante el proceso de investigación. Mis sinodales, Luis Benet, Rafael Barrio, Adrian Huerta, Chuming Wang y Luis Aragón, hicieron también comentarios, los cuales agradezco profundamente, pues ellos me ayudaron a pulir esta tesis hasta lo que es ahora.

Así mismo, quisiera agradecer a Carl Dettmann, Thomas Gilbert y Michael Schmiedeberg por las muy fructíferas discusiones que tuve durante esta investigación, así como el apoyo que me brindaron para presentar mi trabajo en diferentes ocasiones. También quisiera agradecer Domokos Szász y Jürgen Horbach,

quienes me hicieron comentarios y propusieron problemas nuevos a estudiar en lo que respecta a los gases de Lorentz cuasiperiódicos.

Por otra parte, quisiera mencionar el apoyo de mi familia, quienes me empujaron en los momentos difíciles y me dieron recursos económicos siempre que lo necesité. En particular mi madre, Gabriela Kraemer, estuvo siempre al pendiente y me brindó apoyo económico en absolutamente todas mis necesidades. Mis hermanos Alberto y Mónica, tuvieron siempre la atención de escucharme, con quienes tuve oportunidad de organizar mis ideas de mejor forma y Carlos Ríos, quien apesar de ser abogado hizo varias veces el intento de comprender en lo que trabajaba.

Me gustaría así mismo mencionar a César Carranza, amigo entrañable, quien tuvo la paciencia de discutir el problema que aquí se trató, además de apoyarme moralmente en todas mis decisiones. También quisiera destacar la ayuda de Iliusi Vega, Georgina Heredia y Clare McLennan-Kissel, quienes me ayudaron con la redacción de los artículos y me inspiraron de forma única a terminar este doctorado. Por último me gustaría mencionar algunos de las personas que fueron un apoyo moral durante este proceso y quienes sin ellos probablemente no habría concluido este trabajo. Antonia Lema, Ana Bertha Ponce, Heinrich Terborg, Tatiana Niembro, Roberto Dansair, Aude Chertier, Miriam Rangel, Margarita Gonzalez, Pablo Pineda, Yadira Valdivieso, Mizton Pixan y Falconi Magaña.

Resumen

Este trabajo tiene como finalidad introducir un nuevo método para estudiar sistemas cuasicristalinos, en particular gases de Lorentz cuasiperiódicos. Con este método, es posible resolver el problema de la falta de condiciones periódicas a la frontera en arreglos cuasiperiódicos. Con esta visión de los sistemas cuasiperiódicos es posible, no solo hacer simulaciones, sino también resolver algunos problemas analíticamente.

Como muestra del poder del método desarrollado, demostramos la existencia de horizontes principales, los cuales están relacionados con efectos superdifusivos en el caso de gases de Lorentz periódicos. También fue posible encontrar numéricamente para qué valores de los radios los canales desaparecen, volviendo el sistema uno de horizonte finito. También fue posible hallar analíticamente para qué valores los obstáculos se enciman.

Los resultados encontrados analíticamente, fueron verificados de forma numérica, encontrándose además, que los sistemas cuasiperiódicos tienen también, propiedades difusivas intermedias entre el caso periódico y el caso desordenado.

Abstract

In this thesis, we introduce a new method for studying quasicrystalline systems, including quasiperiodic Lorentz gases. With this method it is possible to solve the problem of the absence of periodic boundary conditions in quasiperiodic arrangements. This allows us to perform simulations of quasiperiodic systems, and to answer analytically certain questions about such systems.

As evidence of the power of this method, we prove the generic existence of channels ("principal horizons"), regions in which particles can move without collision, in quasiperiodic Lorentz gases. The presence of such regions leads to superdiffusive behavior in periodic Lorentz gases. We also find numerically for which values of the radii these channels disappear, changing the system into a finite-horizon one. Furthermore, it is possible to find analytically for which radius the obstacles overlap.

The analytical results were verified numerically. In addition, we find that quasiperiodic systems have diffusive properties intermediate between the periodic case and the random case.

Índice general

I	Marco teórico	XI
1.	Introducción	1
1.1.	Motivación	1
1.2.	Propiedades de transporte	6
1.3.	Contenido de la tesis	7
2.	Cristales y vidrios	11
2.1.	Estados metaestables y vidrios	11
2.2.	Cristales	15
2.2.1.	Cristales versus vidrios	16
2.3.	Cuasicristales	18
2.4.	Simetrías	22
3.	Sistemas difusivos	27
3.1.	Ecuación de difusión	28
3.2.	Movimiento Browniano	30
3.3.	Difusión anómala	33
4.	Modelos de gases de Lorentz	35

4.1. Billares dinámicos	35
4.2. Gas de Lorentz	38
4.2.1. Modelos periódicos	40
4.2.2. Modelos desordenados	43
4.2.3. Modelos cuasiperiódicos	44
4.3. Modelo de lattice gas de Lorentz	46
5. Estructuras cuasiperiódicas	51
5.1. Definiciones	51
5.2. Métodos de construcción de retículas cuasiperiódicas	53
5.2.1. Método de deflación–inflación	54
5.2.2. Método dual generalizado	56
5.2.3. Métodos de proyección	60
5.3. Propiedades geométricas	63
II Resultados	67
6. Construcción del billar	69
6.1. Periodización de un gas de Lorentz cuasiperiódico	72
6.2. Billar 2–dimensional	76
6.3. Billar 3–dimensional de un gas de Lorentz 2D	78
6.4. Billar 5–dimensional: Gas de Penrose–Lorentz	81
6.5. Simulaciones numéricas	85
6.6. Canales	88
6.7. Generalizaciones del modelo	89

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	IX
7. Resultados numéricos	93
7.1. Trayectorias	93
7.2. Desplazamiento cuadrático medio	96
7.3. Obstáculos pequeños	96
7.4. Canales efectivos	99
7.5. Obstáculos encimados	103
7.6. Camino libre	104
8. Conclusiones	109
8.1. Conclusiones	109
8.2. Trabajos futuros	111
A. Artículo publicado	131

Parte I

Marco teórico

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

La materia en estado sólido siempre presenta un orden de corto alcance [1]; sin embargo, no siempre presenta un orden de largo alcance. El orden de corto alcance es impuesto por los requisitos típicos de los enlaces químicos (locales). Incluso en los materiales como los vidrios de silicio, los cuales regularmente se consideran completamente amorfos, existe un orden de corto alcance que es substancial [1]; Cada átomo de silicio está rodeado tetraédricamente por cuatro átomos de oxígeno a una distancia de 1.62\AA , y la separación típica del oxígeno es 2.65\AA . Si bien es posible detectar uno o dos rasgos estructurales más en vidrio de sílice, el material carece de orden de largo alcance que es típico en cristales.

Desde 1784, cuando Abbé Haüy [2] mostró que la repetición de celdas en forma de paralelepípedos podía explicar la forma externa de un cristal, asumiendo que los cristales tienen orden de largo alcance, la definición clásica de cristal era la siguiente: Es una sustancia en la cual los átomos que la constituyen

están colocados con un orden regular, repitiendo un patrón tridimensional [3]. Esta definición supone de manera implícita que un cristal teórico es infinito y periódico.

Los cuasicristales son cristales que no poseen una simetría de traslación, es decir, son aperiódicos, pero sí tiene un orden de largo alcance [4]. En la actualidad estos materiales se producen comúnmente con aleaciones de metales, por ejemplo aluminio y magnesio [5] (ver figura 1.1), aunque se han encontrado otros materiales con los cuales también se pueden obtener estas estructuras [6, 7, 8, 5]. Por su descubrimiento en 1984, Dan Shechtman recibió el premio Nobel de química en el año 2011 [9]; sin embargo, hasta la fecha son en realidad pocas las aplicaciones tecnológicas que se le han encontrado a estos materiales. El premio Nobel fue otorgado entonces, más que por la utilidad práctica del descubrimiento, por haber creado un nuevo paradigma del estado sólido.

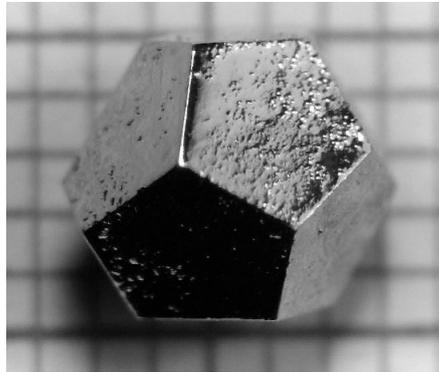


Figura 1.1: Cuasicristal de Magnesio y Zinc. Producido en AMES laboratory [10]. Se puede ver que a diferencia de un cristal común, éste forma un arreglo pentagonal.

Como resultado de este nuevo paradigma, la unión internacional de cristalografía se vio obligada en 1991 (7 años después del descubrimiento de los

cuasicristales) a redefinir lo que es un cristal para incluir así los cuasicristales. En esta nueva definición se considera un cristal a “cualquier sólido que tiene un diagrama de difracción esencialmente discreto” [11]. Además se agrega que un cristal aperiódico, es un cristal en el cual no existe ningún tipo de lattice periódica que lo contenga. De esta forma, se incluye la definición de cuasicristal mencionada antes, un cristal con simetría rotacional “prohibida”.

Este hallazgo no se trataba sólo de un material que extendiera la definición de cristal, sino la evidencia de un hueco en la teoría del estado sólido, en particular de la cristalografía, un material cuya existencia se consideraba teóricamente imposible [12, 13].

Ya antes del descubrimiento de los cuasicristales había una fuerte discusión sobre las características y propiedades geométricas de los materiales en estado sólido. Usualmente, en las transiciones de fase líquido-sólido, existe un calor latente y la estructura de la materia en estado sólido es cristalina; sin embargo existen muchos materiales donde la transición líquido-sólido se puede dar de manera continua (sin ser una transición de fase) y sin la presencia de dicho calor latente. En este caso, la estructura de las moléculas en el estado sólido es desordenada, por lo que se les conoce como sólidos amorfos o vidrios[14]. Esta clase de estructuras desordenadas se encuentran también típicamente en fluidos, por lo que se postuló que los sólidos amorfos eran en realidad líquidos cuya viscosidad era demasiado grande para poderse medir en tiempos de laboratorio [15]. Incluso se creyó que los vidrios en las iglesias antiguas estaban “escurridos”, pues se trataba de líquidos cuya viscosidad permitía al material fluir en tiempos del orden de siglos. Más tarde esta creencia fue rebatida [15], continuando la discusión sobre si los vidrios son o no fluidos, aunque es cada vez más aceptado

que se trata en realidad de sólidos.

En su trabajo[16] Shechtman pretendía producir un vidrio metálico al reducir abruptamente la temperatura de una aleación, como comúnmente se forman los vidrios. Lo que observó fue que, en vez de producir un vidrio, había producido un “cristal” cuya simetría parecía ser de orden 5 [16], lo que quiere decir que, al girar la muestra un ángulo de $2\pi/5$ obtenía el mismo patrón de difracción. De hecho, dependiendo la forma en que lo giraba, Shechtman identificó simetrías de orden 5, 3 y 2 (ver figura 1.2), con lo que concluyó que la estructura del cristal era icosaedral. Este patrón de difracción era, sin embargo, un patrón de difracción esencialmente discreto, lo que significa un orden de largo alcance, observado antes sólo en cristales. La estructura de este material se parecía a la de un cristal (y no a la de un vidrio, donde el patrón de difracción es continuo), pero uno que era teóricamente imposible (como mostraremos más adelante).

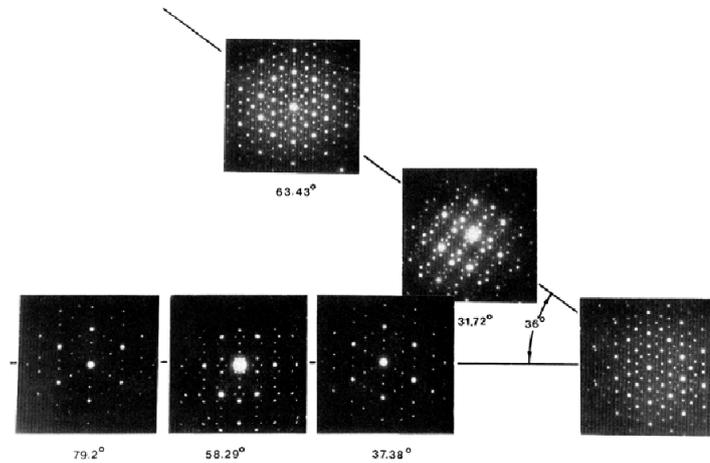


Figura 1.2: En esta imagen se puede ver que el cuasicristal encontrado por Shechtman presenta 3 simetrías, correspondientes a un arreglo icosaedral [16].

Desde aquel momento, hasta la fecha se ha reproducido cientos de veces los experimentos de Shechtman usando diferentes aleaciones metálicas, obte-

niendo diferentes versiones de cuasicristales con simetrías “prohibidas” (ver por ejemplo [6, 7, 8, 5, 10]). También se han encontrado cuasicristales en la naturaleza [17, 18] y dadas las condiciones tan precisas en las que se pueden producir dichos materiales, el encontrarlos en la naturaleza puede dar información muy clara de las condiciones en las que se formó el material. Por otra parte, ha habido una gran cantidad de trabajos experimentales y teóricos que se han realizado sobre los cuasicristales y sus propiedades físicas.

En lo que se refiere a la geometría de estos materiales, los primeros estudios teóricos (hasta donde es del conocimiento del autor) datan de los años 70's [19], en lo que se conoce como *teselaciones aperiódicas* y de lo cual se hablará en el capítulo 5.

Hay pocos trabajos teóricos que se refieran a las propiedades termodinámicas o eléctricas (ver por ejemplo [20]), aunque sí se han hecho algunos esfuerzos por hacer simulaciones para comprender la transición de fase que produce esta clase de materiales (ver por ejemplo [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28]). En cuanto a los trabajos experimentales, los estudios realizados van más allá de la producción y estudio de su geometría. Se han estudiado las propiedades ópticas [29, 30], se han caracterizado las propiedades termodinámicas y electrónicas [31, 4], se han estudiado las propiedades de transporte [20, 32, 5, 33, 34] y también se han localizado otros sistemas que no corresponden directamente al estado sólido [35, 36, 37, 38, 39].

1.2. Propiedades de transporte

Aunque hay una extensa cantidad de estudios experimentales y teóricos sobre los cuasicristales, en lo que refiere a las propiedades difusivas de estos materiales, existen muy pocos trabajos teóricos o computacionales, a pesar de la importancia que ello puede tener. Se ha postulado que el conocimiento que puede generar esta clase de estudios puede ayudar a comprender bajo qué condiciones se forman estos materiales y con ello, quizá reducir los costos de producción [33, 25]. Por otra parte, las propiedades difusivas dentro de esta clase de sólidos está relacionada con la conductividad eléctrica y de calor [20], además de estar relacionadas con la termoelectricidad [31] del material. Aunado a esto, el estudio de la difusión en los cuasicristales desde un punto de vista puramente matemático resultan interesantes [40], por tratarse de un caso intermedio entre los modelos periódicos y los modelos desordenados.

Por otro lado, a pesar de la gran cantidad de estudios que se han hecho sobre la geometría de estos materiales, aún hay aspectos que no se han explorado lo suficiente y de los cuales se podrían obtener generalizaciones sobre propiedades que cumplan tanto cristales clásicos como cuasicristales. Ejemplo de esto es la ley (regla) de Bravais [41, 24, 42], la cual ya se ha mostrado experimental y numéricamente que cumple para cuasicristales (y que más adelante mostraremos que también cumple para cuasicristales) y una posible generalización del teorema de Bloch, la cual aún no existe [43, 44], a pesar de que sí se ha usado este teorema para la visualización del espectro de energías y eigenestados de un cuasicristal fotónico [45].

En cuanto a los trabajos experimentales, pareciera que las propiedades de los

cuasicristales son una mezcla entre las propiedades de los vidrios y las propiedades de los cristales, pero en lo que se refiere a la difusión, experimentalmente el comportamiento se cree que es más parecido al de un vidrio [46, 47], lo cual mostraremos más adelante no es necesariamente correcto, sino que podría tratarse de un problema del tamaño del sistema.

Una de las razones por la cual hay una carencia de estudios computacionales (y teóricos) sobre los cuasicristales es la falta de condiciones periódicas a la frontera. No es posible incluir esta clase de condiciones a la frontera de forma directa, pues ello reproduciría necesariamente un cristal periódico. Esta ausencia de periodicidad hace las simulaciones en dimensiones mayores a 1 demasiado lentas [48]. Al existir esta carencia de condiciones periódicas, algunas herramientas usadas para el análisis teórico y computacional de cristales (como el teorema de Bloch) dejan de ser válidos. Además, esta ausencia de periodicidad no permite hacer simulaciones en sistemas “infinitos”, por lo que las simulaciones computacionales son siempre sobre aproximaciones a los sistemas aperiódicos y no sobre verdaderos sistemas aperiódicos. Por otra parte, en estos sistemas aperiódicos, no es claro cómo elegir condiciones iniciales uniformes, lo cual podría tener implicaciones importantes si no se tratase de un sistema ergódico y esto aún no ha sido probado.

1.3. Contenido de la tesis

La parte central de esta tesis es la introducción de un método con el cual se pueden “periodizar” los sistemas cuasicristalinos y con ello estudiar tanto teórica como numéricamente algunas propiedades de los cuasicristales, haciendo

accesibles las simulaciones numéricas y también dando un método para elegir condiciones iniciales uniformes.

Como ejemplo, se estudia un gas de Lorentz cuasiperódico, el cual se ha sugerido como un reto dentro de la teoría de billares dispersivos [40]. Para este caso, se demuestra que en general, los gases de Lorentz cuasiperiódicos tienen canales donde las partículas pueden moverse libremente (lo cual resulta inesperado), si el tamaño de los obstáculos es suficientemente pequeño, tal como sucede en el caso periódico. Este mismo resultado demuestra también de manera clara que la regla de Bravais se cumple también para cuasicristales, algo que se ha sugerido ya con anterioridad [24, 41].

Por otra parte, se estudian los gases de Lorentz cuasiperiódicos en el límite donde las partículas están localizadas, con el fin de observar el parecido entre cuasicristales y vidrios.

Así, este estudio no sólo da un método eficiente para hacer simulaciones, sino que generaliza algunas propiedades de los cristales periódicos y muestra algunas propiedades que comparten los vidrios con los cuasicristales y que son únicas de los materiales aperiódicos. En particular se responde a la pregunta ¿Qué tipo de difusión presenta un gas de Lorentz cuasiperiódico?

También se muestra que los gases de Lorentz cuasiperiódicos pueden o no presentar lo que se conoce como “horizonte localmente finito”, lo cual los vuelve interesantes desde un punto de vista matemático.

En el siguiente capítulo se profundiza en la explicación del estado cristalino y el estado vítreo, así como su relación con los cuasicristales.

En el tercer capítulo se desarrollan los principales resultados sobre sistemas difusivos. Se obtiene la ecuación de difusión y se demuestra que el movimiento

Browniano cumple con esta ecuación.

El modelo en el que se basó este estudio es el del gas de Lorentz, por lo que se hará, en el cuarto capítulo de esta tesis, un resumen sobre los principales resultados en lo que respecta a gases de Lorentz.

En el quinto capítulo se presentan los tres principales métodos de construcción de arreglos cuasiperiódicos. De estos métodos, durante el desarrollo de esta tesis se usaron dos de ellos. El método restante es igualmente poderoso y es posible que su análisis arrojara resultados importantes; sin embargo, por cuestión de tiempo, no fue posible estudiarlo suficiente. Aun así, se presenta aquí, pues el resultado principal obtenido en esta investigación, se encuentra en un paso intermedio de la deducción de ese método.

En el sexto capítulo se presenta un método para analizar los gases de Lorentz cuasiperiódicos de manera sencilla, a la vez que se puede usar para hacer simulaciones de estos gases. Se muestra explícitamente el modelo para 3 casos, en el que se incluye el gas de Penrose–Lorentz. Es importante remarcar que el método que se presenta puede servir para diversos modelos y no sólo para gases de Lorentz. Además, puesto que el problema se reduce a un problema periódico, se da una forma de generar condiciones iniciales homogéneas en esta clase de sistemas aperiódicos. En este capítulo se muestran los resultados analíticos de esta tesis.

En el Séptimo capítulo se presentan los resultados numéricos, así como un análisis de estos. Finalmente, en el octavo capítulo se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Cristales y vidrios

Para comprender con más precisión qué es un cuasicristal, es primero necesario comprender las propiedades de los cristales y los vidrios. En este capítulo se da una definición más precisa de lo que es un vidrio, se muestran algunos resultados sobre el estudio de estos materiales para entender por qué, en algún sentido los cuasicristales son un estado intermedio entre los vidrios y los cristales y finalmente se presentarán algunos resultados de la teoría clásica de cristales, para comprender mejor por qué los cuasicristales muestran un hueco en esta teoría y por lo tanto no pueden ser tratados de forma clásica.

2.1. Estados metaestables y vidrios

Cuando se enfría (o calienta) un líquido, se puede lograr tener estados que termodinámicamente son inestables, donde la materia se encuentra en estado líquido, a pesar de que dada su temperatura y presión le correspondería estar en estado sólido (gaseoso), ya que ese estado es su estado de equilibrio termo-

dinámico, es decir, el estado con menor energía libre; sin embargo, la energía libre puede tener más de un mínimo local, aunque sólo tenga un mínimo global, y por ello el sistema puede ser temporalmente estable, o “metaestable”, aunque no sea un estado de equilibrio termodinámico. Por ejemplo, al aumentar la temperatura del agua de manera “cuidadosa” (lo cual incluye evitar que el líquido esté en contacto con sólidos o gases) mediante elaborados sistemas de laboratorio, ha sido posible aumentar la temperatura del agua, a una atmósfera de presión, hasta 279.5°C [49]. También es posible lograr esto usando radiación de microondas. El autor no encontró datos de las temperaturas que se pueden alcanzar usando microondas, pero en un experimento casero alcanzó hasta 145°C a aproximadamente 0.77 atm , a cuya presión normalmente el agua debería evaporarse a una temperatura de aproximadamente 91°C . Cuando esto se logra, se dice que el líquido está sobrecalentado y se encuentra en un estado metaestable, de manera que una perturbación puede producir la explosión de la gota de agua calentada a estas temperaturas (por ejemplo, al mezclarse con azúcar). Las precauciones tomadas en los experimentos tienen el propósito de eliminar sitios preferenciales de formación de una nueva fase.

Otro ejemplo se da al reducir la temperatura del agua por debajo de los 0°C , mediante una tasa alta de pérdida de calor, pero al mismo tiempo sin cambios en la presión y con las mismas precauciones tomadas en el caso de líquidos sobrecalentados. Cuando esto se logra, se dice que el líquido está “sobreenfriado” y también se encuentra en un estado metaestable, de manera que una perturbación puede provocar la transición de fase. Algunos materiales es posible sobre-enfriarlos al grado de conseguir que la viscosidad supere cantidades que son medibles en un laboratorio y sin pasar en ningún momento por

una transición de fase, en este caso lo que se obtiene son vidrios. A diferencia del proceso de sobreenfriamiento, en el sobrecalentamiento, no existe un estado final al que se puede llegar que sea diferente del estado gaseoso, aunque existen formas de pasar de un estado líquido a uno gaseoso, sin necesidad de pasar por una transición de fase.

Cabe mencionarse que estos estados metaestables se encuentran en ambas direcciones de transición, es decir, también existen gases sobre-enfriados (los cuales son usados en cámaras de niebla para detectar rayos cósmicos [50]), y sólidos sobre-calentados. No se abordarán estos casos, pues el interés principal de esta sección es comprender cómo se forma un vidrio lo cual corresponde a los líquidos sobre-enfriados.

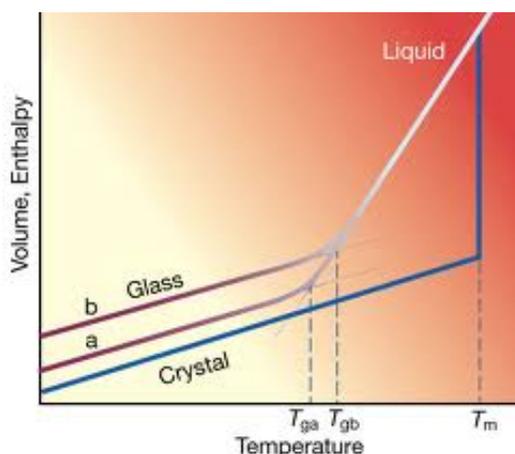


Figura 2.1: Diagrama genérico que muestra cómo se lleva a cabo la transición vítrea comparada con una transición líquido-cristal. Tomada de [51].

Al proceso de formación de un vidrio se le llama *transición vítrea* y a diferencia de una transición de fase no hay una discontinuidad en el volumen o la entropía (y por ello no hay un calor latente). En este proceso, sin embargo, existen algunas propiedades que cambian de forma aparentemente discontinua,

como es el caso de la viscosidad, que crece de manera abrupta.

Por otra parte, mientras que en una transición de fase, dada una presión, existe una temperatura única a la cual ocurre la transición, en las transiciones vítreas, la temperatura de transición depende de la velocidad de enfriamiento del líquido en cuestión.

En la figura 2.1 se muestra un diagrama genérico de cómo se da esta transición vítrea [51]. Otra propiedad aparente de estos materiales, es su arreglo molecular desordenado. Aunque se ha mostrado que existe un orden de corto alcance, a mediano y largo alcance los vidrios no poseen ningún orden, ni rotacional, ni traslacional a diferencia de los cristales.

Para terminar esta sección, se hace remarcar que a diferencia de los líquidos sobreenfriados, los vidrios parecen mantenerse estables inclusive al bajar extremadamente su temperatura. Por ejemplo, si uno hace el experimento con agua (realizado por el autor), el tamaño de la perturbación (por ejemplo agitar el líquido) que se necesita para pasar de líquido a sólido (nuclear) disminuye con la temperatura, mientras que la velocidad de nucleación al ser perturbado el líquido aumenta. Sin embargo, si la temperatura alcanzada es suficientemente baja, el líquido se solidifica sin cristalizar y el material parece estable, es decir, a pesar de perturbar el vidrio de agua (incluso poniéndolo en contacto con hielo cristalizado), el vidrio no se cristaliza. De esta forma, se observa que aunque los vidrios fueran un estado metaestable, en algún sentido su naturaleza difiere de la de un líquido sobreenfriado.

2.2. Cristales

En los cristales, las moléculas se encuentran típicamente acomodadas de manera periódica y con un orden de largo alcance. La mayoría de los materiales forman cristales en el estado sólido; sin embargo, estos cristales pueden, en una escala macroscópica, no ser homogéneos. Un mismo compuesto químico puede tener varias formas cristalinas, conocidas como alotropías, de manera que las diferentes formas alotrópicas del sólido cristalino se pueden combinar formando un material policristalino, el cual en una escala macroscópica podría confundirse con un material amorfo. La diferencia radica en los ordenes de mediano alcance (del orden de micras).

El hecho de que puedan existir diferentes formas cristalinas en un mismo material, puede producir un efecto conocido como “twining”. El twining es el resultado de estudiar la difracción de electrones de dos cristales idénticos al mismo tiempo, pero con diferentes orientaciones. En este caso, los patrones de difracción se superponen y pueden aparentar ser parte de un cristal cuya simetría no corresponde con la verdadera simetría de los cristales, incluso generando la impresión de obtener simetrías prohibidas, como la simetría icosaedra (más adelante se dará una explicación sobre qué es una simetría y por qué no todas las simetrías son posibles en un cristal). Ésta fue una de las principales críticas para explicar los resultados de Shechtman, arguyendo que no era necesario recurrir a la existencia de cuasicristales para explicar sus resultados, pues probablemente se trataba de un policristal que producía el efecto “twining”.

Para dar una idea de cuán complejo puede ser el estudio de las diferentes alotropías de un cristal, en la figura 2.2 se presenta un diagrama de fases

alotrópicas, para diferentes compuestos químicos. En el caso del plutonio se puede ver que hay 7 formas alotrópicas posibles, de las cuales 4 son esencialmente diferentes.

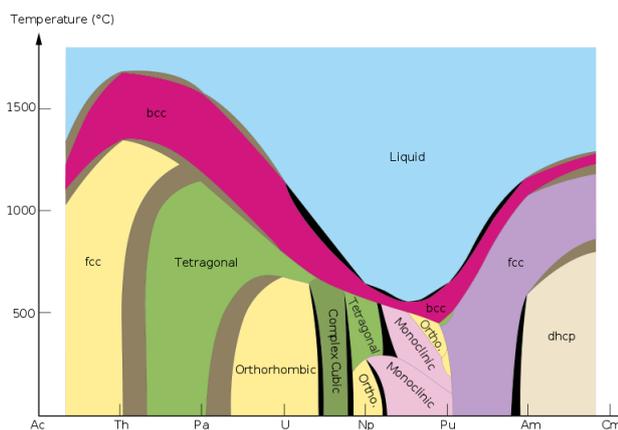


Figura 2.2: Esta figura muestra las diferentes alotropías para diferentes compuestos químicos. Se puede observar que para el caso del plutonio hay 7 formas alotrópicas, de las cuales 4 de ellas son esencialmente diferentes [52].

2.2.1. Cristales versus vidrios

Si un sólido es un material cuya viscosidad es mayor a $10^{13.6}$ Ns/m², en principio no hay razón por la que deba haber preferencia por una determinada estructura en las moléculas; sin embargo, al minimizar la energía libre de un sistema en “estado sólido”, la estructura juega un rol importante [46] y da preferencia a un determinado tipo. Así, aunque no se ha demostrado, se tiene el prejuicio de que la forma en la que se tiende a estar en el estado sólido es una estructura cristalina [53] y por lo tanto, los vidrios son en realidad estados meta-estables. Esta creencia, que se ha confirmado en sistemas simples como

los fluidos de discos duros donde hay un sólo tamaño posible [54, 55, 56] y ha sido probada para cristales bidimensionales a temperatura cero[57], parece estar en contradicción con lo que se observa en la naturaleza, donde es frecuente encontrar sólidos amorfos [58, 14].

Como ya se mencionó antes, un compuesto químico en estado sólido, puede tener diferentes formas alotrópicas. Por ejemplo, el carbón puede presentarse en forma de diamante o bien en forma de grafito (o grafeno); en ambos casos, se trata de un estado cristalino del mismo compuesto químico pero con diferente forma. En el caso de los sólidos amorfos también hay diferentes formas alotrópicas posibles, las cuales generan diferentes propiedades. Por ejemplo, en el caso del agua, se pueden tener diferentes cristales, pero también se conocen al menos 2 tipos de estructuras vítreas, “súper ligera” y “súper pesada” [59] y cada forma tiene diferentes propiedades físicas. En la figura 2.3 se muestra un diagrama de fases de los diferentes estados amorfos del agua. La diferencia con el caso cristalino es que mientras que para un cristal la alotropía depende directamente de su simetría, en los vidrios no es claro qué genera estas alotropías.

Como se muestra en la figura 2.1, la temperatura de transición vítrea se localiza en algún punto entre el estado vítreo y el estado líquido sobrenfriado. Siempre que un material presente tanto transición vítrea como de fusión, la temperatura de transición vítrea será menor que la temperatura de fusión. También se observa que la temperatura de transición vítrea no es única, mientras que sí lo es la temperatura de fusión.

Con respecto a los vidrios, existen una serie de preguntas y discusiones que siguen presentes hoy en día. Aún no es claro si la transición vítrea es una transición de fase de segundo orden (en el esquema de Ehrenfest), o se trata de un

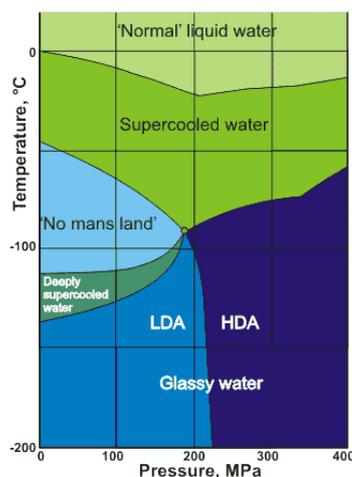


Figura 2.3: Las diferentes fases y alotropías que el agua puede presentar al sobre enfriarse y hasta llegar a un estado vítreo. Tomada de [22]

nuevo tipo de transición [60]. También sigue habiendo la creencia popular de que los vidrios no son un estado diferente de la materia, sino que se trata de líquidos sobre-enfriados cuya viscosidad es extremadamente grande, bajo la idea de que los vidrios de las ventanas muy viejas están escurridos [15]. El premio Nobel, P.W. Anderson considera que “El más profundo y más interesante problema no resuelto en la teoría del estado sólido es probablemente una teoría de la naturaleza de los vidrios y la transición vítrea” [61].

2.3. Cuasicristales

Los cuasicristales, al igual que los vidrios, se producen casi siempre al enfriar líquidos por debajo de su punto de fusión y a una tasa de enfriamiento alta. Esta tasa de enfriamiento es sin embargo insuficiente para formar un vidrio, pero lo suficientemente alta como para impedir la cristalización “típica” del material. A diferencia de los vidrios, sí existe un calor latente en la transición de líquido-

cuasicristal, por lo que esta transición sí se trata de una transición de fase de primer orden [62, 21], al igual que la transición líquido–cristal.

Así, desde un punto de vista termodinámico, los cuasicristales son un estado que se encuentra entre el estado cristalino y el estado vítreo, cuya formación contiene característica tanto de la transición vítrea, como de la típica transición cristalina.

En cuanto a la estructura, los cuasicristales son también un estado intermedio entre vidrios y cristales, pues poseen un orden rotacional de largo alcance (es decir, que su diagrama de difracción permanece invariante ante rotaciones de determinados ángulos), como es el caso de los cristales, pero no posee un orden de traslación, como sucede con los vidrios [16]. Experimentalmente se han encontrado algunas propiedades más similares a los cristales (ver por ejemplo [63]) mientras que otras propiedades se asemejan más a los vidrios[12].

Como ya se mencionó en la introducción, se han encontrado centenares de aleaciones con estructuras cuasicristalinas estables y meta-estables (por mencionar algunas [16, 6, 7, 8, 5, 10]), en particular se han encontrado estructuras cuasicristalinas estables en aleaciones binarias de metales [64, 57], pero hasta ahora no se han encontrado dichas estructuras en metales que no sean aleaciones. Aún queda la pregunta de si es o no posible hacer un cuasicristal con un solo tipo de molécula. También se han encontrado estructuras cristalinas en otra clase de sistemas, como son cuasicristales líquidos [36], copolímeros [37], autoensambles de nanopartículas [38] y colonias de virus [39]. Además, se han encontrado cuasicristales en la naturaleza [18, 17], los cuales se ha sugerido tienen un origen extraterrestre (en la figura 2.4 se muestra el cuasicristal encontrado en el museo de historia natural de Florencia y cuyo origen es extraterrestre). También,

mediante simulaciones ha sido posible encontrar estructuras cuasicristalinas en capas dobles de agua [23], como también en sistemas de tetraedros duros [21], en donde se ha observado una transición de fase de primer orden tal como aparece en los experimentos.



Figura 2.4: Fotografía del cuasicristale encontrado en Rusia y el cual tiene un origen extraterrestre. Este cuasicristal es notoriamente imperfecto en comparación con el construido en laboratorio mostrado en la figura 1.1

. Fotografía tomada de [17]

Aunado a esto, se ha sugerido que los vidrios metálicos son de hecho estructuras formadas por nanocuaricristales [6, 65, 66, 67]. Esto puede dar una importante pista sobre la naturaleza de la transición vítrea, ya que los cuasicristales sí son una transición de fase de primer orden.

En cuanto a las propiedades de transporte de estos materiales, han sido estudiadas de forma exhaustiva [34, 8, 68, 69, 29, 32, 5, 33, 30, 25], puesto que ello es de interés en las aplicaciones tecnológicas [25]. Se han obteniendo resultados experimentales sobre la conductividad eléctrica [31, 70, 44, 47], la conductividad térmica, la termoelectricidad [31] y el transporte de átomos dentro de estas estructuras [8, 69]. Esto último se cree puede ayudar a comprender mejor el

proceso de formación de los cuasicristales y por lo tanto reducir costos en su producción [25].

Las propiedades de transporte térmico y eléctrico en materiales sólidos está normalmente ligado al transporte de fonones y ondas de Bloch que se desarrollan como consecuencia de la naturaleza periódica de los cristales[12]. En los cuasicristales se cree que la ausencia de dicha periodicidad (y por lo tanto la no existencia de un teorema de Bloch) es la causa de comportamientos más parecidos a los encontrados en vidrios que a los encontrados en cristales normales [9].

Otra propiedad curiosa encontrada en los cuasicristales es la existencia de fasones [71]. Esta clase de partículas se pueden entender como viajeras a lo largo de ejes ortogonales al espacio donde vive el cuasicristal y son un equivalente a los fonones (que también están presente en los cuasicristales), pero que viven en espacios ortogonales. Así como los fonones, estas partículas contribuyen al calor específico de los cuasicristales [72, 73].

A pesar de todos los estudios experimentales que se han hecho, relativamente poco se ha avanzado en lo que se refiere al análisis teórico y computacional de los cuasicristales, puesto que hasta ahora no existe un método para superar el hecho de que no haya periodicidad. Este hecho no permite usar varias de las herramientas matemáticas desarrolladas para el estudio de los cristales (sistemas periódicos), además de representar un problema en las simulaciones computacionales, pues no se pueden usar condiciones periódicas a la frontera, lo cual reduce sustancialmente los cálculos. Así, la mayoría de los avances en este sentido, se dan usando modelos que aproximan a los cuasicristales mediante cristales con un periodo largo (esto es lo que se conoce como aproximantes cuasicristalinos)[74], o bien haciendo simulaciones en sistemas finitos cuando

el tipo de estudio lo permite. Hasta ahora, estas han sido las únicas opciones viables no experimentales.

2.4. Simetrías

Una de las características de los cuasicristales es que presentan “simetrías prohibidas”, es decir, que contienen estructuras que no pueden llenar el espacio (o el plano) en un arreglo periódico.

Para entender el concepto original de simetría en los cristales, recordemos que antes de la teoría molecular, los cristales eran sólidos limitados por una serie de caras [13]. Los cristales así conocidos se clasificaban en 32 grupos según la posición y orientación de las caras de estos cristales [3]. Hoy en día, esta clasificación se identifica con los 32 grupos puntuales distintos que caracterizan la simetría de una red periódica. Estos grupos se obtienen de la suposición de que un cristal está formado por celdas que se repiten periódicamente, situadas sobre los vértices de una red conocida como red de Bravais.

Redes de Bravais Una red de Bravais es una red de puntos en el espacio formada por unidades que se repiten periódicamente y que parece idéntica cuando se contempla desde cualquier punto de la misma, por ejemplo, una red cúbica. Más adelante se mostrará que las posibles rotaciones de una red de Bravais pueden ser sólo de orden 1,2,3,4 y 6, con lo cual se demuestra que rotaciones de orden 5, como las encontradas en cuasicristales icosaédricos, son prohibidas. En principio con esto se podría demostrar que existen sólo 14 (ver figura 2.5 (a)) redes de Bravais esencialmente diferentes para el caso de un espacio tridimensional, y 5 (ver figura 2.5 (b)) para el caso bidimensional y a su vez con

ello es posible encontrar los 32 grupos cristalográficos posibles [13, 12], pero ello excede los propósitos de esta tesis, por lo que sólo se esbozarán las bases para dicha demostración y se remite al lector a revisar la bibliografía correspondiente [75, 76].

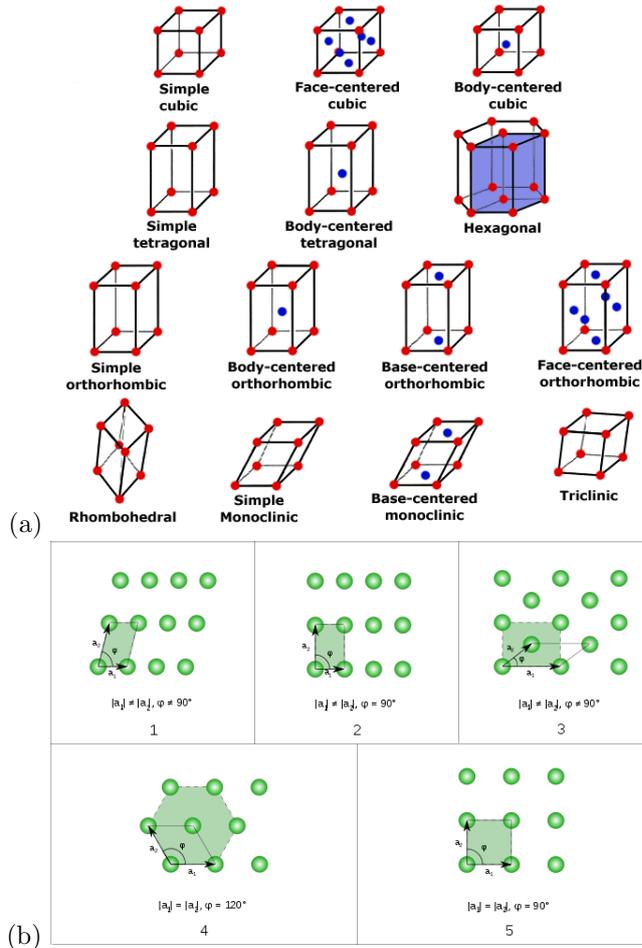


Figura 2.5: (a) Las 14 redes de Bravais posibles en el espacio. (b) Las 5 redes de bravais posibles en el plano. Nótese que entre las 5 redes del plano, ninguna tiene simetría pentagonal, así como tampoco entre las 14 redes en el espacio. Tomada de Wikipedia.

Una estructura cristalina se forma colocando una base (es decir, un conjunto

de átomos o moléculas) en cada uno de los puntos de la red de Bravais.

Para dar una definición más precisa de lo que es una red de Bravais, necesitamos primero definir el operador de traslación $\mathbf{T}_\mathbf{A}$ en un espacio de dimensión m :

$$\mathbf{T}_\mathbf{A}\mathbf{n} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{A} \quad (2.1)$$

donde el operador $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$ es el producto punto entre los vectores \mathbf{x} y \mathbf{y} . \mathbf{n} es un vector de dimensión m y cuyas entradas son números enteros y \mathbf{A} es una matriz cuadrada de dimensión $m \times m$, que puede ser pensada como un vector de dimensión m cuyas entradas son vectores de dimensión m (los renglones de la matriz) y son los vectores primitivos de la traslación.

Usando este operador podemos definir una red de Bravais $\mathcal{B}_\mathbf{A}$ como un arreglo infinito de puntos discretos, tales que si $\mathbf{P} \in \mathcal{B}_\mathbf{A}$, entonces existe un vector de dimensión m y coordenadas enteras \mathbf{n} tal que $\mathbf{P} = \mathbf{T}_\mathbf{A}\mathbf{n}$ y además, si $\mathbf{P}_i, \mathbf{P}_j \in \mathcal{B}_\mathbf{A}$ entonces $\mathbf{P}_i + \mathbf{P}_j \in \mathcal{B}_\mathbf{A}$.

Consideremos la colección de operaciones de simetría, tales que aplicadas a un punto del espacio lo dejan fijo. A los grupos que se forman con esta colección de operadores se les conoce como grupos puntuales. Las operaciones de simetría que se suelen considerar son:

1. Centros de inversión: Un punto \mathbf{P} es un centro de inversión, si para cada vector de posición \mathbf{r} tal que $\mathbf{P} + \mathbf{r}$ es un punto de la red, $\mathbf{P} - \mathbf{r}'$ también es un punto de la red.
2. Plano de reflexión: Un plano es un plano de reflexión, si para cada punto de la red, existe otro punto de la red, tal que la distancia de cada uno de los puntos al plano sea igual a la mitad de la distancia entre ambos

puntos.

3. Ejes de rotación: Un eje de rotación es de orden n , si al girar el cristal sobre el eje un ángulo de $2\pi/n$ se obtiene el mismo arreglo.
4. Eje de rotación-inversión. Un eje es de rotación-inversión, si la coincidencia se alcanza al girar el cristal y después aplicar una inversión con respecto de un centro.

Para que dos redes de Bravais sean esencialmente distintas, debe existir algún elemento de algún grupo puntual que deja invariante una de las redes, pero no a la otra.

Los ejes de rotaciones posibles en un cristal corresponden a ordenes $n = 1, 2, 3, 4$ y 6 . Se hará una demostración de este hecho. Supongamos que \mathbf{P} y \mathbf{P}' son dos puntos vecinos de una red bidimensional, que distan una distancia a y se encuentran repetidos periódicamente en la dirección $\mathbf{P} - \mathbf{P}'$. Además, existen otros dos puntos \mathbf{P}_1 y \mathbf{P}'_1 que distan también a de \mathbf{P} y \mathbf{P}' debido a la simetría de rotación y la periodicidad de la red (ver figura 2.6). Estos puntos se pueden obtener también mediante una rotación de un ángulo $2\pi/n$ de la red por un eje que pase por P y por uno que pasa por \mathbf{P}' , tanto en sentido horario, como antihorario. Además, el segmento $\mathbf{P}_1\mathbf{P}'_1$ debe permanecer paralelo al segmento $\mathbf{P}\mathbf{P}'$ y su longitud b debe ser un múltiplo entero de a , es decir $b = ia$ con $i \in \mathbb{N}$. Observando la figura 2.6 se concluye que

$$b = a + 2a \cos(2\pi/n) = ia \quad (2.2)$$

con lo cual, mediante algunas operaciones trigonométricas, se obtiene que

$$\cos(2\pi/n) = \frac{(i-1)}{2} = \frac{j}{2} \quad (2.3)$$

con j entero. Esta ecuación sólo permite los valores de n mencionados antes, con lo que se termina la demostración de que simetrías rotacionales de orden 5 son incompatibles con la posibilidad de tener periodicidad para redes bidimensionales. Sin embargo, las redes de Bravais tridimensionales son, colecciones de planos separados periódicamente, según la definición que dimos de una red de Bravais, por lo que queda demostrado que incluso en el caso tridimensional, ejes de rotación, perpendiculares a cualquiera de los planos que forman la red de Bravais, no pueden tener simetría rotacional de orden 5, de lo que se sigue que una estructura icosaedra no puede ser periódica y por lo tanto su simetría es una simetría prohibida.

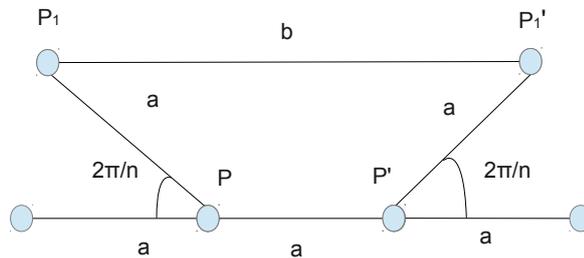


Figura 2.6: Construcción de rotaciones compatibles con la traslación para el plano.

Para concluir este capítulo, vale la pena mencionar que lo que se conoce como redes de Bravais en cristalografía, en matemáticas se conoce como “lattices” o “retículas” periódicas.

Capítulo 3

Sistemas difusivos

Uno de los principales propósitos de esta tesis es estudiar los procesos difusivos en estructuras cuasiperiódicas con la finalidad de comprender mejor el transporte dentro de los cuasicristales. Para ello comenzaremos con una revisión de lo que es un proceso difusivo y algunas características de la ecuación clásica de difusión. Esta es una ecuación diferencial en derivadas parciales que modela el transporte de “algo” (por ejemplo, átomos, fotones, electrones) cuando las concentraciones de ese algo son diferentes en dos regiones. Precisamente es esto lo que entendemos como difusión, es decir, un proceso de movimiento relativo entre dos o más componentes en sistemas donde existen regiones de alta concentración y regiones de baja concentración [77].

Comenzaremos este capítulo derivando la ecuación de difusión utilizando leyes de conservación.

3.1. Ecuación de difusión

Sea $A_i(a, t)$ una cantidad extensiva (por ejemplo energía, número de partículas, momento, etc.) etiquetada con el subíndice i con el que se enumeran las diferentes cantidades y contenida en la celda a al tiempo t . Se llamará $\Phi_i(a \rightarrow b)$ a la cantidad de A_i transferida de la celda a a la celda b por unidad de tiempo. Nótese que $\Phi_i(a \rightarrow b)$ es un flujo neto entre a y b de manera que:

$$\Phi_i(a \rightarrow b) = -\Phi_i(b \rightarrow a). \quad (3.1)$$

La celda a puede tener una fuente de la cantidad A_i . El cambio por unidad de tiempo de $A_i(a, t)$, $dA_i(a, t)/dt$ es entonces la suma de las contribuciones de las otras celdas y la de la fuente. Esto es:

$$\frac{dA_i(a, t)}{dt} = -\sum_{b \neq a} \Phi_i(a \rightarrow b) + \Phi_i(\text{fuente} \rightarrow a), \quad (3.2)$$

la cual es la *ecuación de conservación* de la cantidad A_i .

Ahora, llamemos $\rho_i(\vec{r}, t)$ a la densidad de la cantidad A_i , de modo que la integral de $\rho_i(\vec{r}, t)$ sobre el volumen de la celda $V(a)$ es $A_i(a, t)$;

$$A_i(a, t) = \int_{V(a)} \rho_i(\vec{r}, t) d^3r. \quad (3.3)$$

Podemos entonces definir la densidad de corriente $\vec{j}_i(\vec{r}, t)$. Si $\Delta\vec{S}$ es la pequeña cantidad de superficie orientada que separa las celdas a y b , el flujo puede ser re-escrito como

$$\Phi_i(a \rightarrow b) \simeq \Delta\vec{S} \cdot \vec{j}_i(\vec{r}, t). \quad (3.4)$$

Ahora, sea $s(a)$ la superficie que envuelve a a : el flujo total que cruza $S(a)$

está dado por la integral de superficie de la corriente:

$$\Phi_i^S(t) = \int_{s(a)} d\vec{S} \cdot \vec{j}_i(\vec{r}, t). \quad (3.5)$$

Usando el teorema de Stokes, se obtiene

$$\Phi_i^S = \int_V d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i(\vec{r}, t) \quad (3.6)$$

y la ecuación (3.2), donde el término $\Phi_i(\text{fuente} \rightarrow a) = \int_V d^3r \cdot \sigma_i$, donde σ_i es una densidad. Finalmente se obtiene:

$$\int_V d^3r \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \int_V d^3r \cdot \sigma_i - \int_V d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i(\vec{r}, t). \quad (3.7)$$

Como esta ecuación es válida para todos los volúmenes, se obtiene la ecuación de continuidad en su forma diferencial:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \sigma_i - \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i(\vec{r}, t). \quad (3.8)$$

Usando esta ecuación se derivará ahora la ecuación de difusión.

Supongamos que la *ley de Fick* se satisface, entonces, $\vec{j}_i(\vec{r}, t) = -D\vec{\nabla} \cdot \rho_i$. Además, supongamos que la cantidad A_i se conserva, entonces, $\sigma_i = 0$. Entonces, si D no depende de la posición, tenemos que:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = D\nabla^2 \rho_i, \quad (3.9)$$

que es la ecuación de difusión.

La solución a esta ecuación en una dimensión es:

$$\rho_i = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp(-x^2/4Dt), \quad (3.10)$$

donde $N = \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_i(x, t)$.

Entonces,

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt, \quad (3.11)$$

donde $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \cdot \rho_i(x, t)$.

Una situación similar se obtiene en dimensiones más altas, obteniéndose la ecuación

$$\langle x^2(t) \rangle = 2dDt, \quad (3.12)$$

donde d es la dimensión del sistema.

3.2. Movimiento Browniano

En esta sección se mostrará que el comportamiento de un sistema de partículas que se mueven aleatoriamente (como en la figura 3.1) corresponde a un sistema difusivo, que cumple con la ecuación (3.11). Finalmente se ocupará la ecuación de difusión obtenida en la sección anterior para obtener el coeficiente de difusión en este sistema. Dicho sistema fue observado y reportado por primera vez por el botánico inglés Rober Brown en 1828, por lo que el movimiento de las partículas dentro de él, se le conoce como “movimiento Browniano”.

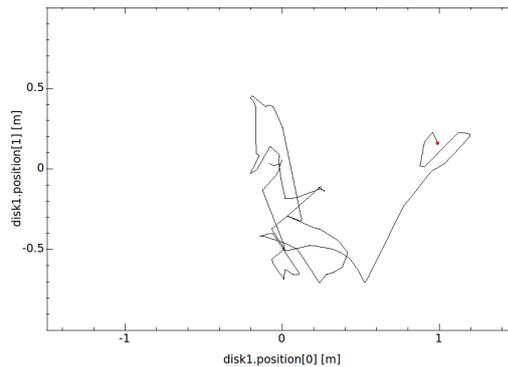


Figura 3.1: Caminata aleatoria o movimiento Browniano de un disco duro masivo en un fluido de discos 50 duros ligeros. La simulación de este proceso se hizo mediante dinámica molecular.

Lo que Robert Brown observó fue que al colocar un grano de polen en agua a temperatura ambiente, este ejecutaba movimientos irregulares, los cuales hoy se identifican como la dinámica de un proceso estocástico [78]. En 1905, Albert Einstein pudo explicar esta clase de movimientos basándose en la teoría molecular del calor y con su trabajo obtuvo una ecuación de difusión para partículas Brownianas [79], la cual se deducirá usando la técnica de Langevin presentada en [78].

Suponga por el momento que todo se desarrolla en una dimensión. Considere una partícula de masa M suspendida en un líquido cuya viscosidad es η y que se encuentra en condiciones normales de temperatura y presión, $p = 1\text{atm}$ y $T = 20^\circ\text{C}$ (reproducible fácilmente en el laboratorio). Considere que la masa m de las moléculas que constituyen el líquido es mucho menor que la de la partícula suspendida. Dado que la partícula suspendida colisiona una enorme cantidad de veces con las muchas moléculas del líquido, su velocidad $v(t)$ y su posición $x(t)$ se puede asumir que no corresponden a un movimiento determinístico (puesto que resulta imposible resolver los millones de ecuaciones de todas las moléculas y la sensibilidad a las condiciones iniciales es muy grande), sino más bien, un movimiento aleatorio. Por esta razón, tanto $v(t)$ como $x(t)$ se considerarán variables aleatorias.

Esta condición no cambia en nada que la fuerza que sufre la partícula sea

$$F_T(t) = M \frac{dv(x)}{dt}, \quad (3.13)$$

salvo por el hecho de que la fuerza entonces es también una función de variables aleatorias.

Ahora bien, si v es la velocidad de la partícula y esta tiene una forma esférica (de radio r), entonces la fuerza de fricción que sentirá será proporcional a esa

velocidad y a la viscosidad del líquido, $F_f = 6\pi r\eta v$, que si fuese la única fuerza que actuara, la velocidad de la partícula tendería a 0 para tiempos grandes. Sin embargo, debido al teorema de equipartición, se requiere que la partícula suspendida en el líquido posea una energía cinética promedio de:

$$\frac{1}{2}M\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{2}. \quad (3.14)$$

Entonces, para tiempos muy largos, la velocidad cuadrada promedio no es 0 y por lo tanto, la velocidad de la partícula tampoco lo es (aunque el promedio sí pueda serlo). Esto implica que la fuerza que actúa sobre la partícula es de la forma:

$$F(t) = 6\pi r\eta v + X(t), \quad (3.15)$$

donde $X(t)$ es una variable aleatoria que debe originarse debido a los impactos de las moléculas del fluido contra la partícula de masa M .

Esta ecuación, combinada con la ecuación (3.13) da como resultado:

$$M \cdot \frac{dv(x)}{dt} + 6\pi r\eta v = X(t) + F_e x(t), \quad (3.16)$$

donde $F_e x(t)$ es una posible fuerza externa, que por el momento se puede ignorar. Dada la naturaleza de $X(t)$, sabemos que $\langle X(t) \rangle = 0$, pues se considera que el sistema es isotrópico y no haya razón para pensar que la partícula se mueve preferencialmente en una dirección.

Multiplicando la ecuación (3.16) por x y sustituyendo v por \dot{x} , se obtiene:

$$M \cdot \left[\frac{d}{dt}(x\dot{x}) - \dot{x}^2 \right] = 6\pi r\eta x\dot{x} + xX(t) \quad (3.17)$$

Tomando promedios temporales y suponiendo que el valor de $X(t)$ no está correlacionado con x (es decir, $\langle xX(t) \rangle = \langle x \rangle \langle X(t) \rangle = 0$), usando la ecuación

(3.14), obtenemos que

$$M \cdot \frac{d}{dt} \langle x\dot{x} \rangle - k_B T = 6\pi r \eta \langle x\dot{x} \rangle, \quad (3.18)$$

donde también se usó la propiedad de ergodicidad al suponer que $\langle dx\dot{x}/dt \rangle = d\langle x\dot{x} \rangle/dt$.

La solución de la ecuación 3.18 es $\langle x\dot{x} \rangle = C \exp(-\alpha/Mt) + \frac{k_B T}{\alpha}$, donde $\alpha = 6\pi r \eta$. Si suponemos que para $t = 0$, $x = 0$, obtenemos que $C = -k_B T/\alpha$, que al integrar se obtiene:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\alpha} \left[t - \frac{M}{\alpha} (1 - \exp(-\alpha/Mt)) \right] \quad (3.19)$$

Para tiempos muy largos, la ecuación (3.19) tiende a la ecuación (3.11), donde podemos identificar $D = \frac{k_B T}{\alpha}$ como el coeficiente de difusión para el movimiento Browniano en una dimensión. Dicho coeficiente cambia, por el teorema de equipartición, al cambiar la dimensión del sistema, pero sigue siendo independiente del tiempo (multiplicando este coeficiente por los grados de libertad de la partícula).

3.3. Difusión anómala

En la sección anterior se demostró que si se trata de un sistema de partículas que no interactúan entre ellas y cuyos movimientos son aleatorios, el sistema presenta difusión “normal”, es decir, cumple con la ecuación (3.19) para tiempos suficientemente largos, lo que significa que:

$$\langle x(t)^2 \rangle \sim Dt, \quad (3.20)$$

donde el símbolo $A(t) \sim B(t)$ significa que $\lim_{t \rightarrow \infty} A(t)/B(t) = 1$.

Esta clase de comportamientos es típico de muchos sistemas, como el de la difusión de gases, la difusión de tinta en agua [80] y muchos otros. No obstante, existen sistemas donde el tipo de difusión es más “rápido” y también donde es más “lento”. Por ejemplo, se ha visto que en determinadas mezclas de fluidos donde unas moléculas son mucho más grandes que otras, determinados agregados de moléculas se mueven mucho más rápido que otras, presentando trayectorias donde por momentos no tienen ninguna colisión [78]. Este tipo de trayectorias se les conoce como vuelos de Lévy y una de sus características principales es que siguen un comportamiento anómalo de difusión, generalmente súperdifusivo y que es de la forma siguiente:

$$\langle x^2 \rangle \sim Dt^\alpha. \quad (3.21)$$

donde α es un número diferente de 1.

Otro ejemplo de difusión anómala mediante vuelos de Lévy, se observa en fluidos rotativos [81], como los que se observan en geofísica donde se investiga el transporte de partículas en el océano y la atmósfera [82].

Cuando en la ecuación (3.21), el valor de la constante α es menor que 1, se dice que lo que se observa es un comportamiento subdifusivo. Esta clase de comportamientos se han encontrado durante la transición vítrea en fluidos de discos duros de dos diferentes tamaños [83] y están relacionados con dicha transición.

Como se verá más adelante, estos no son todos los casos posibles de difusión anómala, pues, en los modelos de gases de Lorentz que se estudiarán en el capítulo siguiente, puede existir una clase de súper difusión “débil”, donde la corrección a los coeficientes de difusión es una función logarítmica.

Capítulo 4

Modelos de gases de Lorentz

Antes de introducir lo que es un modelo de gas de Lorentz, se dará una serie de definiciones y resultados con respecto a los modelos de tipo billar.

4.1. Billares dinámicos

En lo que sigue, consideraremos un billar dinámico o simplemente un billar a un sistema dinámico donde las partículas se mueve a velocidad constante hasta encontrarse con la frontera del billar. En la frontera del billar las partículas realizan una reflexión especular (es decir, producen una colisión elástica) y continúan con su movimiento libre.

Formalmente, un modelo de billar es uno donde las partículas con coordenadas q masa m y momento p cumplen con el hamiltoniano

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \tag{4.1}$$

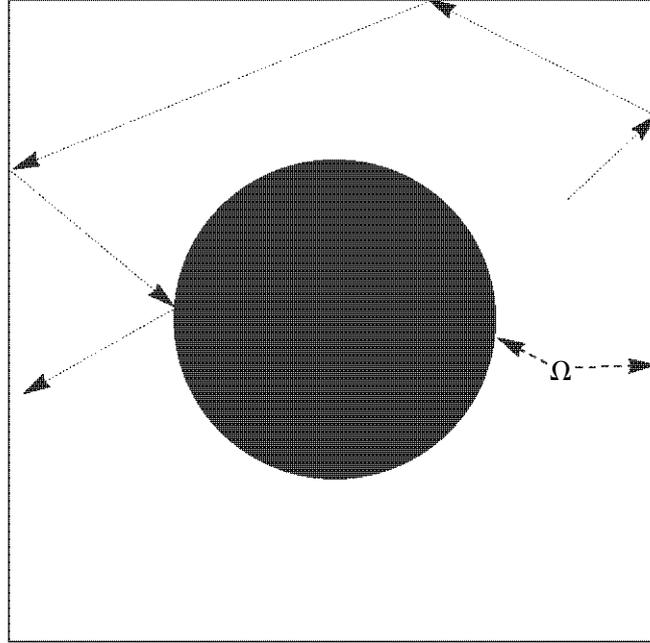


Figura 4.1: Billar de Sinai, el cual es un modelo de gas de Lorentz periódico cuando se considera que cada reflexión en el cuadrado es equivalente a cambiar de celda, y un modelo de billar cerrado cuando se interpreta como una sola celda.

donde

$$V(q) = \begin{cases} 0 & q \notin \Omega \\ \infty & q \in \Omega \end{cases} \quad (4.2)$$

siendo Ω la frontera del billar.

El primer término del hamiltoniano se refiere a una partícula de movimiento libre, mientras que el segundo término asegura que habrá reflexión especular al encontrarse con la frontera, pues el potencial es impenetrable y estamos suponiendo que se conserva energía y momento.

Se considera que el billar es cerrado, si Ω forma un dominio cerrado; de otro

modo, el billar es abierto.

Quizá el ejemplo más sencillo de billar cerrado es la idealización del juego de billar, donde las bolas son partículas puntuales y se mueven con velocidad constante a lo largo de la mesa, la cual es un cuadrado de lado 1, hasta encontrarse con las paredes de la mesa, donde tienen colisiones elásticas. En esta idealización se han eliminado las buchacas y la probabilidad de colisionar entre dos bolas es 0 (puesto que se consideran puntuales).

A pesar de la simplicidad de este billar, existen preguntas no triviales al respecto, por ejemplo ¿Bajo qué condiciones una trayectoria llena densamente el espacio en cuestión? Para responder a esta pregunta, notemos que la trayectoria de una partícula así es equivalente a una recta que atraviesa en una cuadrícula, pues cada reflexión en el cuadrado se puede desdoblar haciendo una reflexión del cuadrado completo, sobre la arista donde se da la colisión. Como resultado de este desdoblamiento se obtiene una recta en una cuadrícula. La trayectoria que llenará densamente el billar, será aquella cuya recta equivalente ℓ cumpla con lo siguiente: para cualquier distancia $r \leq \sqrt{2}/4$ (igual a un cuarto de la diagonal del cuadrado del billar), existe un punto de coordenadas enteras P , tal que la distancia entre ℓ y P sea igual a r .

No se abundará en ello, pues el resultado es bien conocido (ver por ejemplo [84]). Las rectas que cumplen con esta condición son aquellas cuya pendiente es un número irracional. El resultado es generalizable a varias dimensiones, en cuyo caso, lo que se requiere es que la recta, plano o hiperplano en cuestión, sea totalmente irracional [53]. Decimos que un subespacio $E \subset \mathbb{R}^n$ es totalmente irracional, si $E \cap L = \{0\}$, donde L es el conjunto de puntos con coordenadas enteras en un espacio \mathbb{R}^n . Este resultado se usará más adelante.

En general, tanto en billares abiertos, como en billares cerrados, una pregunta interesante, es cuándo son ergódicos, es decir, cuando se tiene el mismo comportamiento promediado en el tiempo como promediado en el espacio sobre todos los estados del sistema (del espacio de fases). La respuesta no es para nada evidente y en muchos casos sigue siendo una incógnita si un billar determinado es o no es ergódico. Esto es importante, pues para aplicar muchos de los resultados de la física estadística es necesario que el sistema en cuestión sea ergódico.

Uno de los primeros billares donde se demostró la ergodicidad, fue el que se conoce como el billar de Sinai 4.1. Dicho billar consiste de un cuadrado de lado 1, en cuyo centro se encuentra un disco duro de radio $r < 1$. Mientras el billar que incluye sólo el cuadrado, dada su naturaleza, no es ergódico (aunque las trayectorias cubren densamente el espacio físico, cada partícula cubrirá sólo 4 velocidades diferentes, por lo que no llena densamente el espacio fase, sino sólo capas de él), el billar de Sinai sí lo es. Este billar puede ser considerado como un billar cerrado, cuando se piensa en Ω como el conjunto del rectángulo y el disco duro, pero también se puede ver como un billar abierto, donde Ω es un conjunto infinito de discos duros colocados en los vértices de una red cuadrada.

Cuando el billar de Sinai se ve como un billar abierto, se le conoce como un gas de Lorentz periódico bidimensional.

4.2. Gas de Lorentz

El gas de Lorentz fue propuesto por H. Lorentz en 1905 [85], como modelo de un gas completamente ionizado, donde los electrones libres se mueven tan rápido,

que las interacciones eléctricas son despreciables y las posiciones de los núcleos atómicos, con respecto a las de los electrones, se encuentran prácticamente fijas.

En un modelo así, el potencial más simple que se podría dar a los núcleos como una aproximación, es el de esferas duras, mientras que los electrones deberían ser partículas puntuales, que dada su velocidad, no interactúan entre ellas.

De esta forma, el gas de Lorentz es un billar abierto, donde la frontera (u obstáculos) Ω son esferas colocadas en los vértices de una retícula dada. Cuando la retícula es periódica (o cristalina), se dice que se trata de un gas de Lorentz periódico. De esta forma, puesto que el billar de Sinai es un billar cuyos discos(esferas bidimensionales) se encuentran en los vértices de una retícula cuadrada, el billar en cuestión es periódico y por lo tanto es un gas de Lorentz periódico.

Cuando la red en cuestión sea una retícula desordenada, se dirá que el gas de Lorentz es aleatorio o desordenado; en cambio, cuando la retícula sea cuasiperiódica (más adelante daremos una definición formal de cuasiperiodicidad), diremos que se trata de un gas de Lorentz cuasiperiódico.

De forma general, los gases de Lorentz se han estudiado de manera profunda tanto en el caso periódico, como en el caso desordenado, pero muy poco se ha estudiado del caso cuasiperiódico. Enseguida se mostrarán algunos de los resultados más relevantes al respecto.

En general, debido al resultado de Sinai para la retícula cuadrada en el caso bidimensional, se asume que los gases de Lorentz son en general ergódicos, aunque no se ha probado para todos los casos, lo que podría representar una imprecisión numérica si no se hace una distribución homogénea de condiciones

iniciales; como veremos más adelante, no es siempre claro cómo hacer esto en modelos finitos no periódicos.

4.2.1. Modelos periódicos

Existen muchas variaciones de estos modelos, donde la forma de los obstáculos varía [86, 87] o se agrega algún potencial extra, como por ejemplo un potencial eléctrico [88, 89]. También existen versiones donde las reflexiones no son especulares [90], debido a que los obstáculos se encuentran girando. Todos esos modelos son por demás interesantes, pero en lo que refiere a esta tesis nos limitaremos al modelo descrito al inicio de esta sección. Algunos de los resultados se extienden para estos otros modelos también.

Uno de los principales intereses al estudiar un gas de Lorentz consiste en medir la difusividad, es decir, qué tan rápido se dispersan las partículas a lo largo de todo el sistema. En términos más precisos, se mide como varía el desplazamiento cuadráticos $\langle \Delta x^2 \rangle$ de las partículas con respecto de sus posiciones iniciales al variar el tiempo t . A veces a esto se le llama autodifusión; nosotros nos referiremos simplemente como difusión.

Se ha mostrado, tanto numéricamente [91, 92] como analíticamente [93, 94], que estos modelos pueden presentar super difusión debil, lo que quiere decir que

$$\langle x^2 \rangle \sim Dt \log(t), \quad (4.3)$$

donde D es una constante que depende de la retícula sobre la que se colocan los obstáculos y del radio de los mismos, llamada coeficiente de difusión.

Este tipo de difusión no es la norma entre sistemas difusivos reales, donde lo más común es encontrar difusión normal, que corresponde a la que produce el movimiento Browniano o caminante aleatorio. La intuición entonces nos hace

pensar que si el sistema es caótico, el tipo de movimiento de las partículas dentro, debería ser parecido al de un caminante aleatorio y por lo tanto obtenerse difusión normal. De hecho, cuando no se encuentra súper difusión en esta clase de sistemas, lo que se encuentra es precisamente difusión normal y la razón de ello es precisamente que su comportamiento es similar al de un caminante aleatorio.

Pensemos en el billar de la figura 4.2 (a). Cada casilla marcada, tiene 4 posibles “salidas”, donde la partícula se mueve hacia la casilla de arriba, hacia la de abajo, hacia la izquierda o hacia la derecha. Cada una de las posibilidades tiene igual probabilidad y puesto que el sistema es caótico podemos pensar que en cada casilla, el paso de una casilla a otra será independiente de la casilla de la que provenga. Es aquí donde resulta relevante el hecho de que el sistema sea caótico, pues ello asegura la independencia de movimiento de la partícula de su lugar de procedencia. Es importante también, entonces, que la partícula pase suficiente tiempo dentro de la casilla en cuestión, pero ello, por el teorema de Liouville, debe ser proporcional al área de la casilla e inversamente proporcional al ancho de la salida. En estas condiciones el modelo entonces se comporta como un caminante aleatorio en una red cuadrada, lo cual da como resultado difusión normal y efectivamente, numéricamente se verifica [95].

El caso de la figura 4.2 (b), es un tanto diferente, puesto que hay una porción de partículas que pueden moverse libremente sin colisiones durante un tiempo t tan largo como se quiera, es decir, contribuyen durante ese tiempo, al desplazamiento cuadrático medio como t^2 (pues siguen un movimiento libre). El conjunto de partículas que contribuyen de esta manera durante un tiempo infinito, es de medida cero, sin embargo, se ha mostrado, tanto numéricamente como analíti-

camente, que la distribución se mantiene Gaussiana, pero escalando con $t \log(t)$, es decir, se tiene una difusión como la ecuación (4.3). El caso dos dimensional fue considerado por Zacherl et al. [96], quien dio fórmulas aproximadas para la función de correlación de la velocidad. Más tarde Bleher [97] probó algunos resultados necesarios para derivar los coeficientes exactos de difusión. Szász y Varjú [93] completaron la demostración para el caso de tiempos discreto, donde hallaron una distribución normal, recurrencia y ergodicidad en todo el espacio. Más recientemente Chernov y Dolgopyat [94] demostraron para el caso continuo una convergencia débil a un proceso de Wiener (movimiento Browniano).

Estos resultados se han extendido para el caso multidimensional, donde se ha mostrado que para que haya super difusión (que el sistema se tenga que reescalar con $t \log(t)$) en un gas de Lorentz periódico la dimensión de los canales debe ser en general $n - 1$, donde n es la dimensión del gas de Lorentz. Los primeros trabajos basados en argumentos heurísticos y simulaciones numéricas fueron realizados por Sanders [92]. Más tarde Dettmann obtuvo fórmulas explícitas para los coeficientes de difusión, y conectó el problema con la hipótesis de Riemann para el límite de obstáculos pequeños [98]; junto con ello postuló 3 conjeturas sobre el tiempo de vuelo libre en esta clase de billares. Muy recientemente Nándori, Szász y Varjú demostraron dos de las tres conjeturas planteadas por Dettmann [99].

Así, el estudio de gases de Lorentz periódicos no sólo ha tenido importancia dentro de la física, sino también en el ámbito de las matemáticas. En resumen, dentro de la física estos modelos han sido usados como generadores de caos dentro de la dinámica no lineal [100] y con ello explicar uno de los principales métodos para producir caos (defocalización); al mismo tiempo, han servido de

modelo de transporte [88, 89], en los cuales se han encontrado regímenes superconductores [89]. Dentro de las matemáticas son un ejemplo simple (quizá el más simple) donde se presenta difusión determinística (y caos determinístico) y que ha dado espacio para numerosos estudios [95, 101, 102, 91, 97, 103, 104]. El límite cuando los obstáculos son pequeños ha dado lugar también a algunos desarrollos, entre los cuales las técnicas para hacer simulaciones eficientes utilizan la teoría analítica de los números [84], al mismo tiempo que su estudio en sí se conecta con la hipótesis de Riemann, la cual se ha considerado ya por más de un siglo como uno de los problemas matemáticos más importantes a resolverse [105].

4.2.2. Modelos desordenados

El gas de Lorentz desordenado (Random Lorentz Gas) es en realidad el que usó H. Lorentz para modelar un gas completamente ionizado [85]. Este consiste de un conjunto de obstáculos (esferas duras) distribuidos aleatoria y homogéneamente en el espacio y partículas puntuales que no interactúan entre sí y que presentan reflexiones especulares al colisionar con los obstáculos. Las partículas puntuales representan los electrones del gas completamente ionizado y las esferas duras los núcleos atómicos.

Mediante un argumento heurístico sencillo, es posible mostrar que el sistema presenta difusión normal cuando los obstáculos no se superponen entre sí. Lo primero que debemos notar es que si los obstáculos tienen un volumen diferente de cero, con probabilidad cero existirán canales donde las partículas podrían viajar infinitamente con movimiento libre. Esto es debido a que hay una distribución homogénea de los obstáculos y por lo tanto, sin importar el ancho del canal, al

tender el largo de este a infinito, su volumen también tiende a infinito y ello implica que la probabilidad de que un obstáculo esté centrado dentro del canal tiende a 1, si la densidad de obstáculos es diferente de 0. Esta condición elimina la posibilidad de tener súper difusión del tipo $\langle x^2 \rangle \sim Dt \log(t)$; sin embargo, el argumento del caminante aleatorio sigue siendo válido siempre y cuando los obstáculos no se encimen (formando “cajas” donde las partículas pueden quedar encerradas tiempos muy largos).

Numéricamente se ha mostrado que efectivamente, para obstáculos pequeños, el tipo de difusión es “normal” (ver por ejemplo [106, 107, 108]). Por otra parte, en lo que respecta a los sistemas donde los obstáculos se pueden encimar, la situación no es tan clara. Parece ser que para tiempos largos, el tipo de difusión sigue siendo normal; sin embargo, para tiempos medianos y en el límite donde el sistema se vuelve localizado, existe una ventana donde el sistema presenta subdifusión [106, 108, 107]. Esta ventana parece además estar relacionada con un doble escenario de transición vítrea en el caso de un sistema de esferas duras [83].

Por otra parte, la función de autocorrelación difiere notoriamente entre el caso cristalino con respecto al caso aleatorio.

4.2.3. Modelos cuasiperiódicos

Hasta ahora, muy pocos trabajos sobre gases de lorentz cuasiperiódicos se han desarrollado. El autor de esta tesis sólo pudo encontrar dos trabajos al respecto, uno realizado previo a esta investigación [48] y uno recientemente publicado, durante la escritura de esta tesis [109].

La razón de la falta de trabajos en este campo es probablemente la dificultad

que representa la no existencia de condiciones periódicas a la frontera y la novedad del tema con respecto a los sistemas desordenados; sin embargo D. Szász ha sugerido el estudio de gases de Lorentz cuasiperiodicos como un reto dentro del estudio de la dinámica no lineal [40].

El trabajo de Wennberg [48] ocupa un modelo unidimensional en una cadena de Fibonacci (la cual se revisará en el siguiente capítulo), donde los obstáculos se encuentran en los vértices de la cadena y las partículas en vez de seguir movimientos libres, dan brinco de tamaño δx con $\delta x \in (0, a)$ una variable aleatoria y a una constante finita. Si la partícula cae dentro del obstáculo, entonces no da el brinco; en cambio, si la partícula no cae en un obstáculo, entonces se da el brinco. Después de un tiempo largo, se mide la distribución de las posiciones de las partículas. El trabajo concluía que el sistema cuasiperiódico era muy similar al cristalino y no en cambio al caso desordenado donde las distribuciones seguían otra configuración. En ese mismo trabajo se justifica el uso de un modelo unidimensional, dado que las simulaciones son demasiado largas para el caso bidimensional y con argumentos heurísticos, aunque poco convincentes, se explica que el comportamiento debería ser similar en más dimensiones.

El segundo trabajo generaliza los resultados de Wennberg a otras dimensiones, pero para el límite donde los obstáculos tienden a tener un volumen igual a cero. Este límite se conoce como “el límite de Grad–Boltzman”. Se obtiene una distribución de vuelos libres que efectivamente difiere del caso desordenado y se parece más al caso periódico, por lo que sería de esperar que para el límite donde los obstáculos son pequeños, el sistema se comportara parecido a un gas de Lorentz periódico; sin embargo, ninguno de los dos trabajos estudia lo que sucede en el caso donde los obstáculos se enciman y tampoco se hacen

simulaciones para casos intermedios (no en el límite de Grad–Boltzman).

4.3. Modelo de lattice gas de Lorentz

Existe otra versión del modelo de gas de Lorentz que difiere sustancialmente de los modelos presentados anteriormente, pues se trata de una versión discreta y no continua. Este modelo, conocido como el modelo de espejos o lattice gas de Lorentz, tiene sus orígenes en otro modelo que sí es continuo y que es mucho más cercano los modelos de Lorentz de los que hablamos en la sección anterior, el modelo de “árbol–viento” (“wind–tree”) de Ehrenfest.

En el modelo de Ehrenfest, los obstáculos, en vez de ser discos duros, son paralelogramos. Al tratarse de paralelogramos, ya no sólo es importante la distribución de los centros de los obstáculos, sino también la orientación del paralelogramos. Algunas versiones de gas de Eherenfest forman canales poligonales [110] y en ellos se estudia la difusión dependiendo de los ángulos que se formen entre las caras de los polígonos.

Una simplificación de este modelo, es sustituir los paralelogramos por segmentos de recta o “espejos” colocados en los vértices de una red cuadrada. Si los espejos son colocados en dos posibles orientaciones, las cuales llamaremos “derecha” R si el espejo forma un ángulo de $\pi/4$ con respecto al eje de las ordenadas, e “izquierda” L si el ángulo que forma el espejo es de $3\pi/4$. Ahora bien, restringimos las direcciones y posiciones iniciales a que las partículas se muevan sobre las aristas de la retícula. Debido a las posiciones y velocidades iniciales y a las orientaciones posibles de los espejos, las partículas se mantendrán sobre las aristas de la retícula todo el tiempo. Ahora bien, a pesar de la simplificación del

modelo, aún hay una serie de posibles variables. Una de ellas es la proporción de espejos con orientación R respecto a los espejos con orientación L . Otra variable es la distribución de estas clase de espejos. Es claro que con determinadas distribuciones, las partículas podrán difundirse, mientras que con otras distribuciones no podrán hacerlo. Por ejemplo, aseguramos difusión, si la mitad del plano contiene solamente espejos con orientación R y la otra mitad sólo modelos con orientación L . Por otra parte, podemos asegurar que no habrá difusión, si los espejos en si forman una cuadrícula, en cuyo caso, las trayectorias serán cuadrados girados $\pi/4$ respecto a los espejos.

Consideremos un modelo más interesante. Supongamos que hay una distribución homogénea y aleatoria de espejos R y L . Naturalmente, si hay espejos de un sólo tipo, sabemos el tipo de trayectorias que las partículas presentarán y sabemos que hay difusión en una sola dirección. Por esta razón, imponemos la condición de que tanto la densidad de espejos R como la de L es diferente de 0. Ahora bien, la pregunta natural es ¿Bajo estas condiciones el sistema presenta difusión?

Esta pregunta es equivalente a verificar si la probabilidad de que una trayectoria sea abierta, es diferente de 0.

Como primera impresión, el modelo pareciera ser similar a un caminante aleatorio en una red cuadrada y por lo tanto se podría pensar que la respuesta a esta pregunta es que sí, que la probabilidad de que se formen trayectorias abiertas es diferente de 0. Sin embargo, se ha demostrado [111] que esto no es verdad si la densidad de espejos en el sistema es 1, es decir, cuando cada vértice de la retícula está ocupado por un espejo, la probabilidad de formar trayectorias abiertas es 0.

Queda, sin embargo, la incógnita de si para densidades diferentes de 1, puede haber difusión. La primera conjetura a este problema fue que sí, que para densidades menores a 1 la probabilidad de tener caminos abiertos es diferente de 0 [112]. Esta conjetura no parece estar en concordancia con las simulaciones numéricas, en las que parece mantenerse la condición de que para densidades cercanas a 1, la probabilidad de formar caminos abiertos sigue siendo 0 [113, 114]. De hecho, se han dado argumentos heurísticos que apoyan el hecho de que para densidades cercanas a 1, el resultado sigue siendo válido [114]; sin embargo, cuando la densidad de espejos es muy baja, ni las simulaciones, ni los argumentos heurísticos son válidos, por lo que existe la posibilidad de que a partir de una determinada densidad hubiese una transición de fase y el sistema se volviera difusivo. Por otra parte, una versión continua de este modelo presenta efectivamente una transición de fase [115].

De hecho esta conjetura es falsa. Paralelo al trabajo central de esta investigación se ha demostrado que para cualquier densidad diferente de 0, el sistema sigue siendo no-difusivo, presentando difusión sólo a densidad 0. No se abundará más en este resultado, pues no es el propósito de esta tesis, sino sólo presentar un resumen de los diferentes modelos de gas de Lorentz que se han propuesto y estudiado.

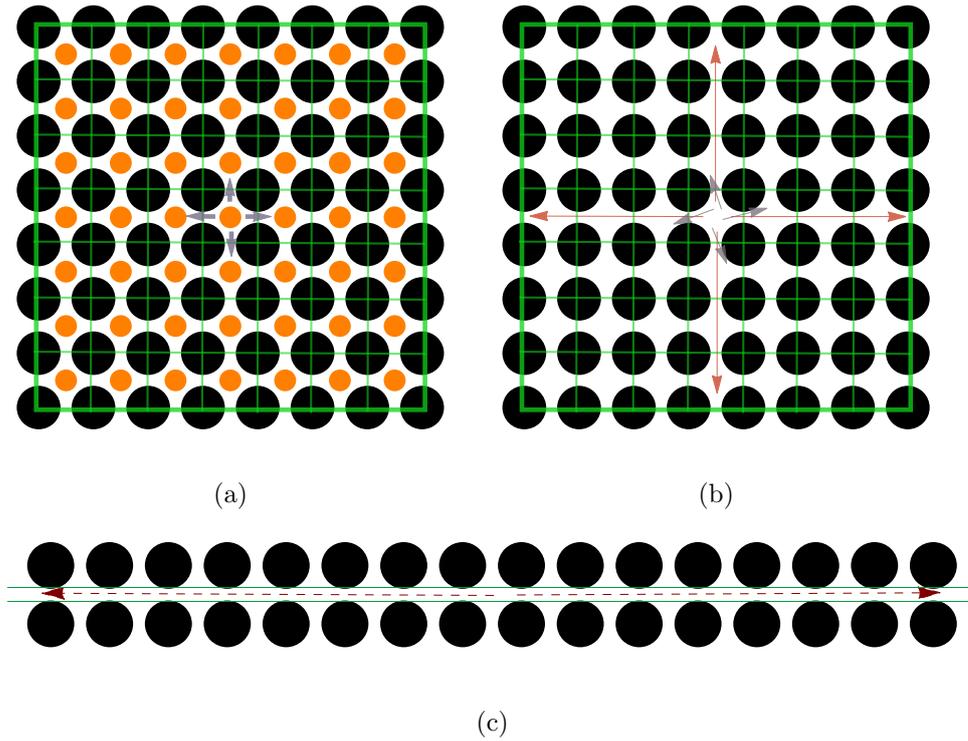


Figura 4.2: En (a) se muestra un gas de Lorentz periódico sobre una retícula cuadrada. En este caso el billar es de horizonte finito. Las partículas se van desplazando entre “casillas” contiguas con igual probabilidad de pasar a una caja o a otra. Esto se aproximar bien con un caminante aleatorio en una red cuadrada. En (b) se muestra un gas de Lorentz de horizonte infinito. Se pueden observar los canales donde las partículas se mueven libremente sin presentar colisiones. En (c) se muestra explícitamente uno de los canales.

Capítulo 5

Estructuras cuasiperiódicas

En el capítulo introductorio, presentamos la definición de lo que se entiende actualmente como un cuasicristal. En ella, de forma implícita, está contenida la definición de retícula cuasiperiódica; sin embargo, vale la pena separar esta definición y a partir de ella construir las reglas para producir sistemas cuasiperiódicos.

5.1. Definiciones

Para entender qué es una *función cuasiperiódica*, es primero necesario definir una *función periódica*.

Una función $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es periódica si existe un vector $w \in \mathbb{R}^n$ tal que $f(x + w) = f(x)$, para todas las $x \in \mathbb{R}^n$ en cuyo caso w es su periodo.

Hay varias definiciones de una *función cuasiperiódica*, entre las cuales la diferencia es sustancial; en algunos casos, no es muy preciso a qué se refiere con esta clase de funciones. En esta sección daremos la definición presentada

en [116].

Con frecuencia se confunde la cuasiperiodicidad (“quasiperiodic-function”) con la casi-periodicidad (“almost-periodic function”). Vale la pena remarcar la diferencia entre ambas situaciones, puesto que no son de la misma naturaleza. Las funciones casi-periódica se refieren a sistemas periódicos no ideales, es decir, son funciones que se pueden aproximar tan bien como uno quiera mediante una serie finita de senos y cosenos. Una de las definiciones más populares es la siguiente:

Una función f es casi-periódica si, para cada $\epsilon > 0$, existe una $\theta(\epsilon)$, tal que $|f(x) - f(x + \theta)| < \epsilon$. En este sentido, las funciones periódicas son en sí funciones casi-periódicas.

En cambio, una función cuasiperiódica se refiere a sistemas ordenados, pero formados por la superposición de sistemas periódicos, cuyos periodos son inconmensurables entre sí. De forma más precisa: una función $f(x)$ es cuasiperiódica si se puede expresar como una suma finita de funciones periódicas $f_n(x)$, tales que los periodos de estas funciones sean todos inconmensurables entre sí. Por ejemplo: $f(x) = \sin(x) + \cos(ax)$, es cuasiperiódica si y solo si a es un número irracional.

En este sentido, todas las funciones cuasiperiódicas son funciones casi-periódicas, pero no todas las funciones casi-periódicas son cuasiperiódicas, pues de hecho, las funciones periódicas son un subconjunto de las funciones casi-periódicas.

Una vez definida una función cuasiperiódica, es necesario definir una retícula (o lattice) cuasiperiódica y para ello, primero definiremos qué es una retícula.

Def: Sean $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k$ un conjunto de vectores de un espacio real de dimensión n . Estos vectores generan, mediante la adición, un grupo contablemente

infinito llamado módulo- \mathbb{Z} . Si los vectores con los que se genera el módulo- \mathbb{Z} son linealmente independientes, decimos que lo que se genera es una retícula. Se puede demostrar que esto es equivalente a que el módulo- \mathbb{Z} sea discreto [117].

Diremos que una retícula es cuasiperiódica, si las posiciones de sus vértices se pueden expresar mediante una función cuasiperiódica. Esta definición contiene a la que se usa para definir a los cuasicristales, que es la siguiente: Una retícula es cuasiperiódica, si presenta algún orden rotacional, pero no presenta un orden translacional, o bien, una retícula ordenada con simetría “prohibida” por la teoría cristalográfica clásica. No resulta fácil hacer esta demostración, sin embargo podemos dar algunos argumentos convincentes de que este resultado es verdadero. Un cristal que tiene una simetría prohibida, por lo visto en el capítulo 2, necesariamente elimina la posibilidad de tener simetría traslacional, por lo que es equivalente tener una simetría prohibida que poseer simetría rotacional y no simetría traslacional. Una lattice se puede generar mediante su dual y usando una base de vectores que mantengan una simetría rotacional, es siempre posible generar una lattice discreta y de hecho, dadas las fórmulas obtenidas en [118], la función de los vértices de dicha lattice es una función cuasiperiódica. Sin embargo, no todas las retículas cuasiperiódicas tienen simetría rotacional.

5.2. Métodos de construcción de retículas cuasiperiódicas

Ahora, es necesario implementar métodos de construcción para obtener retículas cuasiperiódicas. No resulta evidente la forma en la que se pueden construir esta clase de retículas; por ello, en esta sección presentaremos una serie de tales

métodos.

La forma en la que estructuraremos estas construcciones no es la forma en la que se fueron descubriendo los diferentes métodos, sino la forma en la que se fueron implementando en este estudio, es decir, comenzaremos con los métodos más evolucionados y al mismo tiempo, más sencillos de programarse y entenderse y finalizaremos con el más complejo a programarse, aunque también el que nos ayudará a resolver el problema de las condiciones de frontera.

5.2.1. Método de deflación–inflación

Probablemente el método más sencillo de llevar a cabo en la práctica, es el conocido como el método de deflación o a veces también llamado método de sustitución. Otra ventaja de este método es que además de producir la retícula cuasiperiódica, también produce el teselado correspondiente, que es una división del plano (espacio) en un número infinito de celdas, pero de un conjunto finito de formas diferentes, cada una de estas celdas de tamaño finito contiene un número finito de puntos, los cuales forman la retícula.

El método se basa en el uso de transformaciones de autosimilitud, donde una celda dada se subdivide en otras según una determinada regla, conocida como la regla de deflación. Cada una de las nuevas piezas deberá pertenecer a un conjunto finito de teselas, para las cuales hay un conjunto de reglas establecidas para una nueva deflación. Una vez realizada la deflación, se escala el sistema multiplicando sus dimensiones por un determinado factor, de tal forma que las nuevas celdas no se reduzcan de tamaño en cada paso de la iteración. A esto se le conoce como la “inflación”, por lo que el método en conjunto es llamado “método de Deflación -Inflación” [119].

5.2. MÉTODOS DE CONSTRUCCIÓN DE RETÍCULAS CUASIPERIÓDICAS 55

Usando algoritmos de este estilo, uno puede también generar teselados periódicos, por ejemplo, uno podría transformar un cuadrado en cuatro cuadrados de un cuarto de tamaño. Cada uno de esos cuadrados se reescalarían haciéndolos crecer 4 veces su tamaño. El resultado de aplicar esta regla de deflación-inflación iteradamente generaría simplemente una red cuadrada; sin embargo, se han encontrado ya reglas de deflación-inflación para varios teselados cuasiperiódicos, por ejemplo el teselado de Penrose.

Debe notarse que la existencia de esta clase de reglas, sugieren el posible uso de la teoría del grupo de renormalización en el estudio de cuasicristales; sin embargo, relativamente poco se ha avanzado en este ámbito, aunque hay algunos trabajos que sí lo han llevado a cabo en al menos sistemas 1-dimensionales [120, 121].

Como ejemplo del poder de este método pensemos en el conocido caso unidimensional de la cadena de Fibonacci. Las distancias posibles entre un punto y otro no son arbitrarias, sino que siguen una regla concreta (es un sistema ordenado) y las distancias posibles entre dos puntos vecinos son sólo dos, una “larga” y otra “corta”, por lo que suelen llamarse L y S respectivamente. En este ejemplo $L = \tau S$ y $S = 1$, siendo τ la proporción áurea, aunque para el método de deflación, es indiferente cuales son los tamaños de ambos segmentos y es sólo importante que sean diferentes cada tamaño.

Usando las reglas de Deflación-Inflación:

$$L \rightarrow L, S \text{ y } S \rightarrow L$$

Se produce la cadena de segmentos no periódica

$$L, S, L, L, S, L, S, L \dots$$

Esta cadena es la cadena de Fibonacci. Como vimos, hay una regla iterativa

mediante la cual se produce la cadena, pero el resultado no es periódico, por lo que podemos entender esto como un sistema cuasiperiódico. Aunque en una dimensión no existe tal cosa como el orden rotacional o simetrías prohibidas, se puede entender el caso unidimensional como una generalización del método de proyección que se verá más adelante, además de que los vértices de esta retícula unidimensional, están colocados según una función cuasiperiódica, cuyos periodos son 1 y τ . Este mismo ejemplo se puede obtener de diversas formas, pero es este método el que resulta probablemente más simple de realizarse.

De la misma manera, es posible generar la red cuasiperiódica pentagonal mediante las transformaciones que se muestran en la figura 5.1. Este ejemplo se estudia en [119], dónde también se demuestra que el teselado obtenido es cuasiperiódico y es exactamente el teselado de Penrose.

El gran inconveniente de este método es la dificultad para obtener las reglas de deflación–inflación dado un teselado, o bien, dada una regla de deflación–inflación, mostrar que produce un arreglo cuasiperiódico. Otro inconveniente es que el arreglo producido es un arreglo cuasiperiódico sólo en el límite cuando el número de iteraciones tiende a infinito. Por esta razón, cuando se usa este método en las simulaciones, en realidad lo que se obtienen son aproximaciones.

En la figura 5.2 se ven 6 iteraciones consecutivas usando este método, mientras que en la figura 5.3 se muestra sólo el teselado que se obtiene en la sexta iteración.

5.2.2. Método dual generalizado

Este método a veces se conoce también como el método multirejas (multi-grids en inglés) y fue desarrollado en 1981 por de Bruijn[122]. Al igual que el

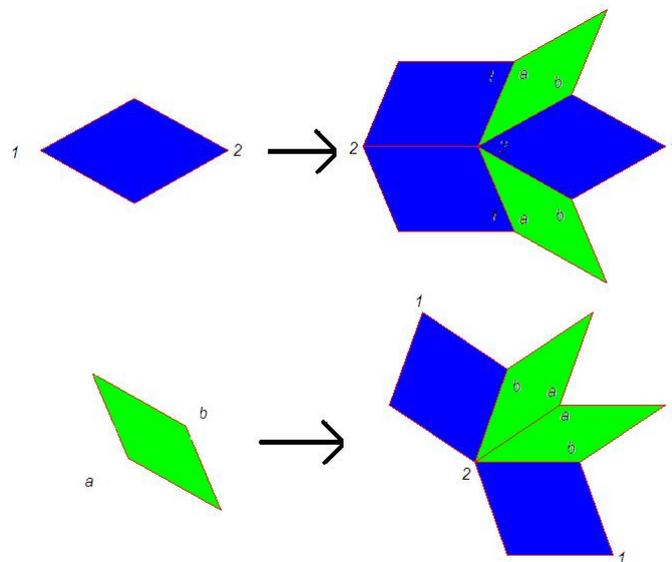


Figura 5.1: Transformaciones para generar un teselado de Penrose. Las letras y números marcadas muestran el orden en que se deben colocar cada pieza para que la transformación sea funcional.

método de deflación-inflación, produce directamente una teselación del espacio.

El algoritmo para construir teselaciones cuasiperiódicas es el siguiente:

1. Se elige un conjunto de k vectores unitarios $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_k$ y linealmente independientes, con $k > n$ (n la dimensión de la retícula cuasiperiódica), los cuales contienen la simetría de la retícula cuasiperiódica que se espera obtener.
2. Se construye un conjunto de líneas (planos o hiperplanos) paralelas entre sí, pero perpendiculares a cada uno de los vectores elegidos inicialmente para obtener una reja (ver figura 5.4). Estas líneas (planos o hiperplanos) satisfacen:

$$\vec{x} \cdot \vec{e}_j = m_j + \alpha_j$$

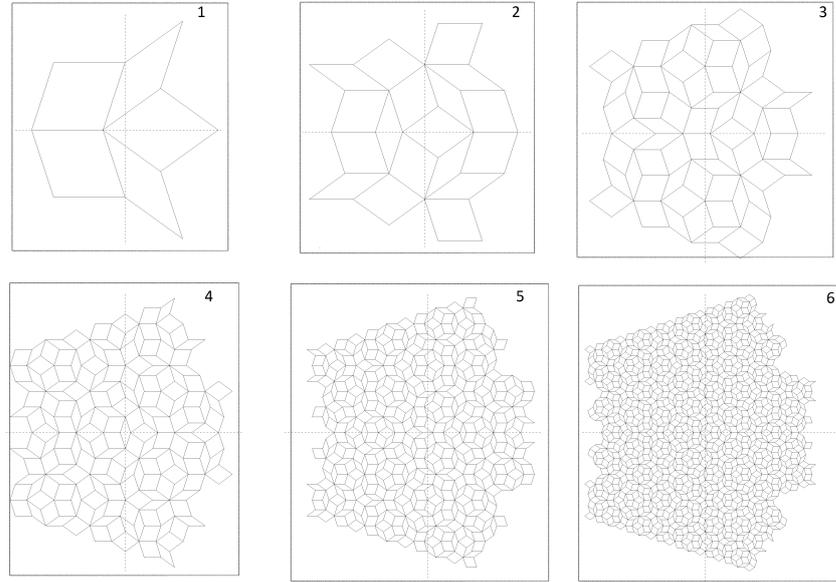


Figura 5.2: Seis iteraciones del método de deflación.

donde m_j es un entero, \vec{x} es un vector $2(n)$ -dimensional y α_j es un desplazamiento de la reja con respecto del cero para evitar que más de n líneas (planos o hiperplanos) de la reja se superpongan en un solo punto.

3. Usando esta construcción, se produce una “prototesela” del teselado. La prototesela correspondiente a un vértice dado de la k -rejilla, es el paralelogramo (paralelotipo) formado por los vectores de los hiperplanos que se encuentran en ese vértice. Debe haber un número finito de estos prototeselados, pues hay sólo $\binom{k}{n}$ configuraciones de intersección.
4. Con copias de las prototeselas, usando la k -rejilla como marcador, se construye el dual ortogonal de la k -rejilla.

Para el caso 2-dimensional y 3-dimensional es posible, usando este procedimiento, encontrar fórmulas explícitas de los vértices de la retícula cuasiperiódica que se genera [118]:

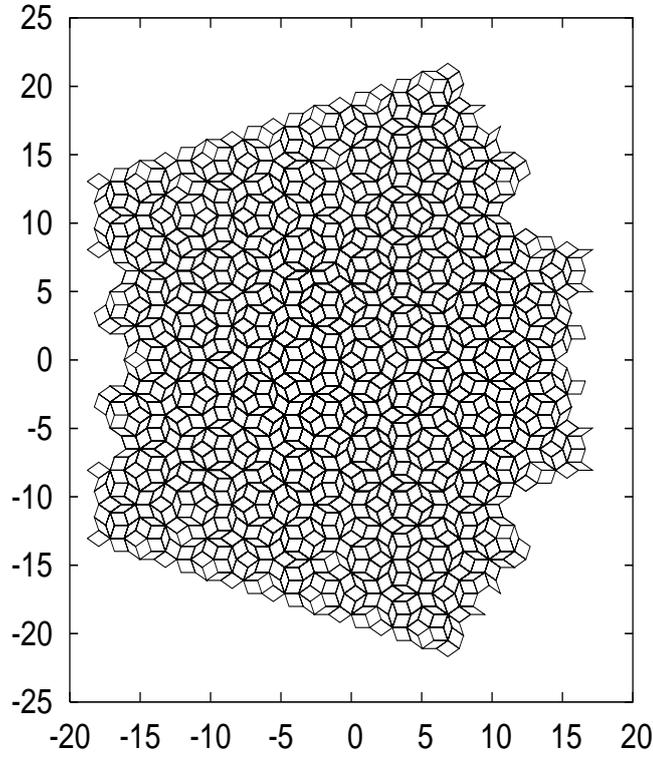


Figura 5.3: Teselado de Penrose generado con el método de deflación/inflación.

La escala muestra que se aplica la inflación, pues el lado de los rombos se mantiene de tamaño 1.

$$\vec{t}_{m_j, m_i}^0 = \sum_{i < j}^N \left[m_j \vec{e}_j + m_i \vec{e}_i + \sum_{l \neq j \neq i} \left(\lfloor x_{m_l} \frac{b_{jl}}{a_{jk}} + x_{m_k} \frac{b_{kl}}{a_{jk}} - \alpha_{l \perp} + 1 \right) \vec{e}_l \right]$$

donde m_j son enteros, $b_{ji} = \vec{e}_j^\perp \cdot \vec{e}_i$, a_{ji} es el área del rombo generado por \vec{e}_j

y \vec{e}_i , $x_{m_j} = \vec{x} \cdot \vec{e}_j = m_j + \alpha_j$.

Los otros 3 vértices del rombo son:

$$\vec{t}_{m_j, m_i}^1 = \vec{t}_{m_j, m_i}^0 - \vec{e}_j$$

$$\vec{t}_{m_j, m_i}^2 = \vec{t}_{m_j, m_i}^0 - \vec{e}_i$$

$$\vec{t}_{m_j, m_i}^3 = \vec{t}_{m_j, m_i}^0 - \vec{e}_j - \vec{e}_i$$

En la figura 5.4 se muestra un teselado cuasiperiódico con simetría de orden

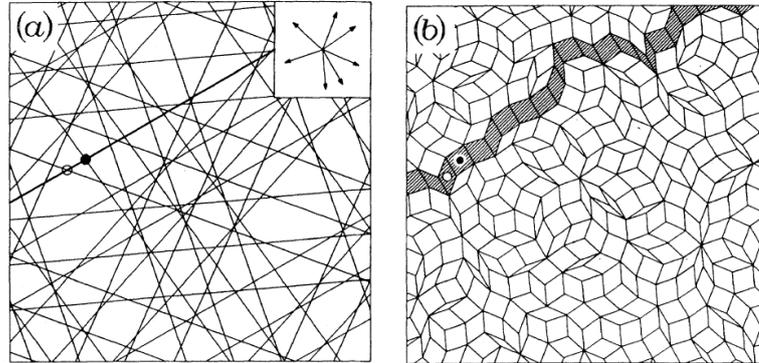


Figura 5.4: Forma en la que se construye un teselado cuasiperiódico utilizando el método dual generalizado para una simetría cualquiera. En (a) se muestra una 7-regilla y sus 7 vectores con la cual se genera dicha regilla. En (b) se muestra la teselación dual producida. Tomada de [123].

7 y también la multireja usada para producir este teselado. Se puede observar un punto tanto en la multireja, como en el teselado, para mostrar cómo se produce el teselado a partir de la dualización de la multireja.

5.2.3. Métodos de proyección

Los métodos de proyección históricamente fueron los primeros en ser desarrollados, siendo pioneros en esto de Bruijn [122] y Kramer [124]. Existen un par de métodos completamente equivalentes, los cuales se conocen como el método “corte y proyección” [125, 117] o simplemente métodos de proyección. Nosotros llamaremos a uno “Método de proyección de Voronoi” y al otro “método de corte y proyección”.

Ambos métodos consisten en construir una retícula cuasiperiódica L_{\parallel} en un subespacio E de un espacio Euclidiano \mathbb{R}^n , proyectando parte de los vértices

de una retícula hipercúbica L , la cual se forma de los puntos de coordenadas enteras del espacio \mathbb{R}^n . E representa el espacio físico real y su dimensión m cumple $m < n$.

Una condición necesaria para que se asegure la cuasiperiodicidad es la “irracionalidad” del espacio E . El espacio debe ser totalmente irracional, lo que significa que $E \cap L = \{0\}$. Si esta condición no se cumple, la lattice que se produce es periódica en por lo menos alguna dirección. Si E es totalmente racional, entonces la lattice que se produce es periódica en cuando menos tantas direcciones como dimensiones tenga E .

La forma de seleccionar cuáles vértices de L se deben proyectar es lo que produce la diferencia entre ambos métodos. En el método de “cortar y proyectar”, primero se produce una banda alrededor de E , la cual se forma a partir del producto cartesiano $E \times W$. Aquí W es la proyección de un hipercubo unitario C de dimensión n en el espacio complementario ortogonal E_{\perp} a E , tal que $E_{\perp} \oplus E = \mathbb{R}^n$. Los vértices de L que se encuentran contenidos dentro de esta banda son los vértices que se proyectan sobre E . En la figura 5.5 (a) se muestra una versión bidimensional de este método, produciendo la cadena de Fibonacci.

En el método de proyección de Voronoi, los vértices que se proyectan son los mismos, pero se seleccionan de forma distinta. Primero se generan las celdas de Voronoi de los vértices de la retícula L . Estas celdas son hipercubos unitarios de dimensión n , centrados en los vértices de L . Se proyectan entonces el centro de uno de estos hipercubos si el espacio E corta el hipercubo en algún punto. En la ver figura 5.5 (b) se muestra también la cadena de Fibonacci, pero producida usando el método de proyección de Voronoi.

Es fácil mostrar que en el caso de la figura 5.5, lo que se obtiene es a lo

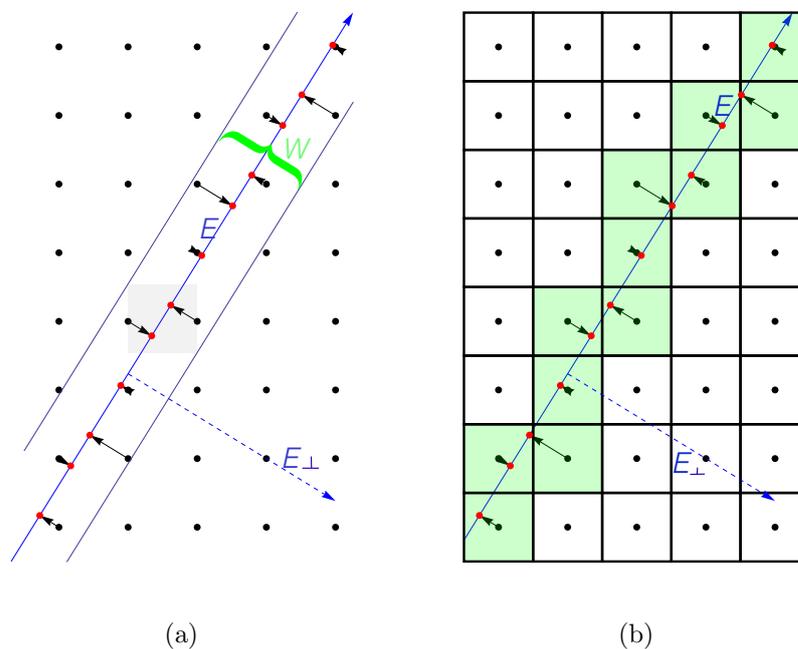


Figura 5.5: En (a) se muestra una versión bidimensional del método de corte y proyección, con el cual se produce una cadena de Fibonacci. Aquí W es la proyección de uno de los cuadrados unitarios sobre el espacio E^\perp . (b) Muestra la misma construcción, pero en el esquema del método de proyección de Voronoi coloreándose en verde las celdas que son rebanadas por el espacio E . En ambos casos, las flechas muestran las proyecciones de los puntos de la retícula L sobre el espacio E .

más 2 tipos de teselas, una corta y una larga. Sin hacer la demostración formal, observemos en la figura 5.5 (b) que siempre que la recta corta a dos cuadrados vecinos que comparten una cara horizontal se produce un segmento corto, mientras que cuando los cuadrados comparten una cara vertical, se produce un segmento largo. Esto es, porque la proyección del segmento que une los centros de dos cuadrados vecinos es $\cos(\theta)$ si son vecinos a lo largo del eje x y $\sin(\theta)$ si son vecinos a lo largo del eje y , donde θ es el ángulo que forma la recta con el

eje de las x .

5.3. Propiedades geométricas

Las teselaciones cuasiperiódicas tienen una serie de propiedades geométricas interesantes. Por supuesto, la más clara es la no periodicidad del arreglo; pero a pesar de no ser un sistema periódico, tienen otra propiedad que hace que dichas teselaciones generen la impresión de ser de hecho periódicas: no importa cuán grande se tome una sección del teselado, esta se repetirá en algún lugar del plano (o espacio)[117]. Esta propiedad hace a los sistemas cuasiperiódicos radicalmente diferentes de los sistemas desordenados.

Otra propiedad interesante, es la que se refiere a la fractalidad de estas teselaciones, y lo que hace tan atractivos los sistemas cuasiperiódicos para ser estudiados mediante el grupo de renormalización. Al cambiar la escala con la que se observa un sistema cuasiperiódico, efectivamente encontramos nuevamente el mismo sistema. En esto se basa el método de deflación, el cual fue encontrado por Penrose [126].

Otra curiosa propiedad, es que no existen reglas de ensamblaje que sean funcionales para asegurar que se producirá una teselación cuasiperiódica, dado un conjunto de teselas (o baldosas). Este problema fue probablemente observado por primera vez por Kepler [117]. Existen, sin embargo, reglas que son necesarias para no producir teselaciones periódicas, pero estas no aseguran que las teselas con las que se pretende llenar el plano (espacio) no se terminen encimando. En la figura 5.6 se muestran dos casos de configuraciones “ilegales” usando una de las reglas populares de ensamblaje para el teselado de Penrose.

Para convencernos de que este resultado puede bien ser real, podemos pensar en el caso unidimensional de la cadena de Fibonacci. Si existiera una regla local de ensamblaje, sólo podría producir una cadena periódica, por lo que con reglas locales no se puede producir dicha configuración, son necesarias reglas globales.

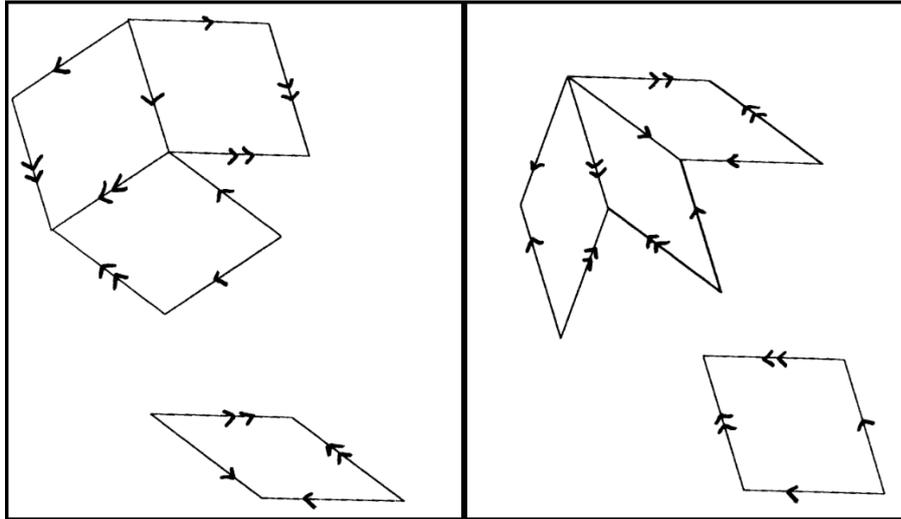


Figura 5.6: Dos configuraciones posibles con las reglas de ensamblaje de Penrose, pero que generan huecos o teselas encimadas. Tomada de [117]

Esta ausencia de reglas locales de construcción dificulta el ensamblaje correcto cuando uno tiene un juego de baldosas para construir su propia teselación. Esta situación presenta un gran problema teórico, pues al no existir reglas locales de construcción, la formación de cuasicristales implica de alguna forma que existe interacción de muy largo alcance. Esta situación no sucede en el caso de los arreglos periódicos, donde las reglas locales son reglas simples que indican qué vecinos puede tener, ni en el caso de los arreglos desordenados, donde las reglas locales de construcción son simplemente un ensamblaje aleatorio.

Otra curiosa propiedad es que, dado un conjunto finito de baldosas que producen un teselado cuasiperiódico, se pueden construir un conjunto infinito,

no numerable de teselados cuasiperiódicos, es decir, existe un conjunto infinito de configuraciones posibles cuasiperiódicas dado un conjunto de teselas y sus reglas de ensamblaje. Esto sucede también con los sistemas desordenados, pero no con los teselados periódicos.

Para el caso del teselado de Penrose, existe un decorado, conocido como el decorado de Ammann [79], el cual, además de producir reglas de ensamblaje, genera una rejilla, la cual en ningún momento toca los vértices de las teselas (ver figura 5.7). Este decorado asegura que al menos para el gas de Penrose–Lorentz existen canales. Más adelante se demostrará que este resultado es general y por lo tanto, para cualquier teselado cuasiperiódico, debe existir un decorado que produzca este efecto.

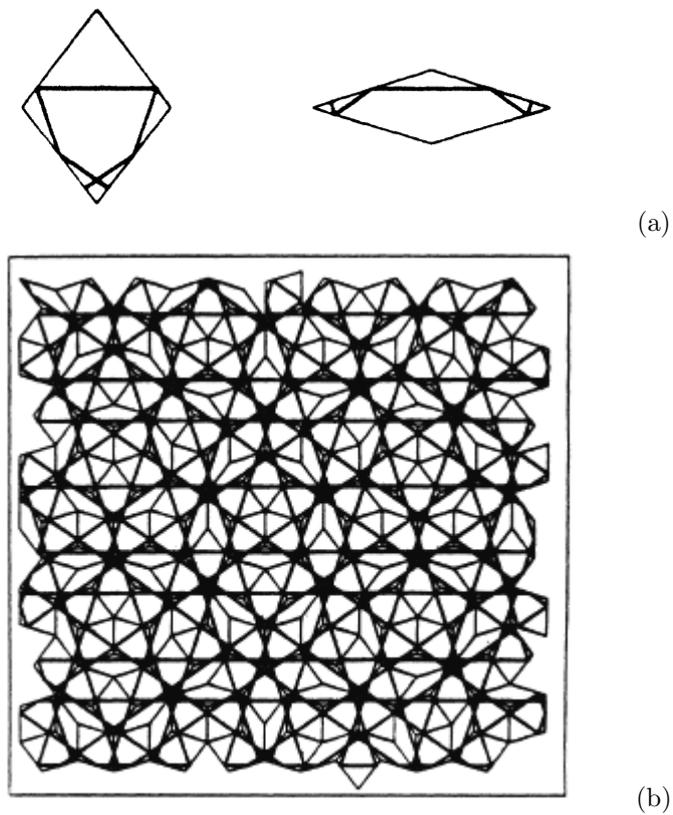


Figura 5.7: (a) Las reglas de ensamblaje de Ammann. Estas baldosas deben usarse asegurándose que en cada ensamblaje los segmentos del decorado ensamblen una línea recta. En caso de lograr producir un teselado de Penrose, el decorado forma una rejilla mostrada en (b). Tomada de [127]

Parte II

Resultados

Capítulo 6

Construcción del billar

En esta tesis, se estudia un modelo de gas de Lorentz cuasiperiódico de forma general, donde los obstáculos se colocan en los vértices de un arreglo cuasiperiódico y las partículas viajan libremente hasta encontrarse con uno de los obstáculos. Cuando esto sucede, las partículas se reflejan especularmente y continúan su camino libremente.

En este modelo no hay interacción entre las partículas, estas son puntuales y el potencial de los obstáculos es un potencial de esfera dura; sin embargo, algunos de los resultados no requieren que el potencial en cuestión sea de esfera dura, sino simplemente que se trate de un potencial de corto alcance (por ejemplo de esfera suave). Tampoco es estrictamente necesario que las partículas sean puntuales para aplicar los métodos que aquí se desarrollan. Nuevamente, es sólo necesario que se trate de un potencial de corto alcance, aunque las modificaciones que se requieren hacer al modelo para que esto sea aplicable no son triviales debido a la interacción entre las partículas.

El gran problema a la hora de hacer simulaciones en sistemas no periodicos,

es justamente la ausencia de condiciones periódicas a la frontera. En algunos trabajos se resuelve esto haciendo aproximantes periódicos a los sistemas aperiódicos[74]. Estos son sistemas periódicos, pero cuyo periodo es relativamente grande. Aunque en algunos sistemas resulta suficiente con estas aproximaciones (ver por ejemplo [56]), esto deja dudas sobre el comportamiento real que un sistema cuasiperiódico (y algunos desordenados) puede tener.

En el caso de los sistemas aleatorios, existen métodos para construir retículas desordenadas suficientemente grandes y aplicar condiciones periódicas a la frontera [128, 129] o bien aplicar condiciones de absorción a la frontera [130]. De manera similar, en sistemas cuasiperiódicos, resulta complicado debido a la falta de reglas locales de construcción [126, 117]. Aún si se tuviera una regla para la construcción, como por ejemplo usando las fórmulas obtenidas en [118], la cantidad de memoria que se requiere para almacenar los datos, crece conforme crece el tamaño del sistema, por lo que las simulaciones se vuelven muy lentas.

Otra opción, la cual ha resultado ser la más realista, es simplemente construir una retícula suficientemente grande, como para esperar que durante el tiempo que se corra la simulación, ninguna partícula se salga del sistema. Esto es efectivo, siempre y cuando las partículas se mantenga un tiempo grande en una región no tan grande. Cuando se hace simulaciones sobre gases de Lorentz desordenados, justamente donde resulta más interesante estudiar la difusión es cuando los obstáculos son lo suficientemente grandes (se enciman) para atrapar las partículas por periodos de tiempo largos, por lo que las simulaciones se pueden hacer sin mayor problema; sin embargo, para el caso cuasiperiódico, la pregunta sobre qué sucede cuando los obstáculos son muy pequeños resulta particularmente importante, pues en el caso de sistemas periódicos, es en este

régimen donde aparece difusión anómala [92, 102] y es ese límite donde se tiene una teoría al respecto de la densidad de vuelos libres [109, 131].

Los primeros intentos por resolver este problema durante el desarrollo de esta investigación fueron, efectivamente, producir retículas cuasiperiódicas suficientemente grandes para mantener las partículas dentro un tiempo largo. Para esto se usó el método de deflación con las reglas de la figura 5.1, produciendo una retícula como la figura 5.3, la cual es una aproximación a la teselación de Penrose. En los vértices de la retícula se pusieron discos duros y las condiciones iniciales fueron un conjunto de direcciones aleatorias, pero saliendo todas las partículas de un solo punto. Con un modelo así, no es posible poner condiciones iniciales homogéneas, pues las partículas cercanas a la frontera, salen muy rápidamente del sistema.

Debe notarse que no se puede seguir las simulaciones cuando alguna partícula sale del sistema, simplemente tomando en cuenta las demás, pues esto haría una selección de las partículas que viven mucho tiempo dentro del sistema, es decir, tendríamos una estadística que diera como resultado siempre difusión normal, pues elegiríamos justamente las partículas que no tuvieran comportamiento súperdifusivo durante el tiempo que hiciéramos la medición (resultado que se obtuvo inicialmente). Por este motivo, las simulaciones sólo se podían realizar durante el tiempo en el que todas las partículas se encontraban dentro del sistema. Esto limitaba el tiempo de las simulaciones a r/v , donde r es la distancia más corta del punto origen a la frontera y v la velocidad de las partículas.

Este modelo resulta poco efectivo, pues aún en sistemas grandes (tanto que es difícil el manejo en la computadora), cuando el radio de los obstáculos es suficientemente pequeño, las partículas escapan rápidamente del sistema y el

tiempo no es suficiente para observar si existe o no súper difusión, aunque ya es posible encontrar una distribución de vuelos libres que sugiere la existencia de canales. Esto sirvió para generar la conjetura de que los gases de Lorentz cuasiperiódicos pudieran tener canales, como mostraremos más adelante.

Con el fin de resolver esta situación, el segundo intento fue usar las fórmulas del método dual generalizado obtenidas por Aragón et al. [118] para producir la retícula cuasiperiódica sólo localmente alrededor de las partículas; sin embargo la eficiencia computacional no mejoró mucho, además de que seguíamos sin tener un método para producir condiciones iniciales homogéneas.

Por último, revirtiendo el método de proyección, generamos un billar con condiciones periódicas a la frontera, el cual es equivalente a un gas de Lorentz cuasiperiódico de dimensión menor. En la siguiente sección explicaremos cómo se construyó este billar, que fue el modelo final en el que se basó el estudio.

6.1. Periodización de un gas de Lorentz cuasiperiódico

Recordemos la notación del método de proyección. Parte de los vértices de una retícula L de dimensión n los cuales se proyectan en un espacio E de dimensión menor m , el cual representa el espacio físico real. El resultado de la proyección de los vértices seleccionados de L sobre E es la retícula cuasiperiódica o quasilattice, L_{\parallel} . La proyección de un cubo unitario en el espacio ortogonal E_{\perp} a E , tal que $E_{\perp} \oplus E = \mathbb{R}^n$, es la ventana W que se usa para delimitar qué puntos de la red se proyectan en E (ver figura 5.5).

La idea de esta construcción es el generar un billar con condiciones periódicas

cas a la frontera, tal que el movimiento de las partículas dentro del billar sea equivalente al de las partículas dentro de un gas de Lorentz cuasiperiódico. Recordemos que este último consiste de un conjunto de esferas duras de dimensión m centradas en cada uno de los puntos de la retícula L_{\parallel} . Entonces, “revirtiendo” el método de proyección de Voronoi, podemos construir directamente un obstáculo de billar K de dimensión n , el cual se encuentre en un cubo unitario C del espacio \mathbb{R}^n con condiciones periódicas a la frontera. C es de hecho una celda de Voronoi de la retícula L , cuyo centro representa los puntos de L que son proyectados sobre E debido a las condiciones periódicas a la frontera. La única restricción de las partículas dentro de este billar es que se muevan siempre *paralelas* al subespacio E .

El primer paso en la construcción de este billar es notar que el cubo C así construido, también contiene a todo el hiperplano E (ver figura 6.1): Consideremos una partícula que se mueve en el hiperplano E dentro del cubo C . Cuando esta partícula alcanza una de las caras de C , saltará hasta la cara paralela debido a las condiciones periódicas a la frontera. La partícula mantendrá la misma velocidad, pero en un plano paralelo E_v a E , con $E_v = E + \vec{v}$, siendo $\vec{v} \in E^{\perp}$; ver la figura 6.1. En este sentido, todo el hiperplano E se puede plegar e incrustar en una celda unitaria.

Ahora notemos que el conjunto de las proyecciones del centro de C sobre cada E_v (proyecciones ortogonales) es justamente la ventana W , salvo por un conjunto de medida cero que corresponde al conjunto de los números racionales, puesto que E es totalmente irracional, por lo que el conjunto de todas las “rebanadas” E_v llenarán densamente el cubo C . Así, el conjunto W de proyecciones del centro de C en las diferentes rebanadas E_v se puede obtener al proyectar los

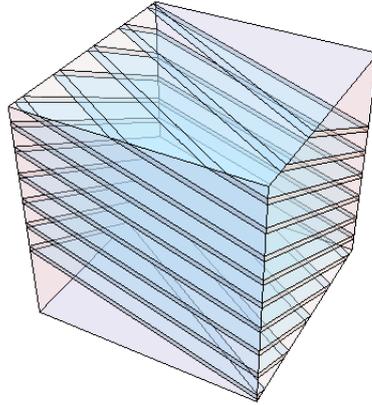


Figura 6.1: Cubo C rebanado por los planos E_v que al desdoblarse producen todo el plano E .

vértices del cubo C sobre E^\perp y tomando su envolvente convexa.

Ahora proyectamos en cada E_v no sólo un punto, sino el obstáculo completo del billar, B , que en este caso es una esfera de dimensión m y radio r centrada en el origen. Como resultado, obtenemos el obstáculo $P = W \times B$ de dimensión n ; sin embargo, algunas partes de P quedarán fuera del cubo C (ver figura 6.2), pues W sobresale en algunos puntos de C . Debemos entonces “periodizar” este conjunto usando las condiciones periódicas a la frontera, “metiendo” la parte del conjunto que sobresale de C , dentro del cubo. Al nuevo conjunto “periodizado” lo llamamos K , completando la construcción del billar.

Como inicialmente las partículas se mueven con una velocidad paralela al plano E y debido a que el eje W del obstáculo K es ortogonal a E , las partículas se mantendrán siempre sobre un plano paralelo a E .

Finalmente, para recuperar la trayectoria de las partículas en el gas de Lorentz cuasiperiódico, es necesario “desdoblar” la trayectoria usando las condiciones periódicas a la frontera, tal como se hace en los gases de Lorentz periódicos,

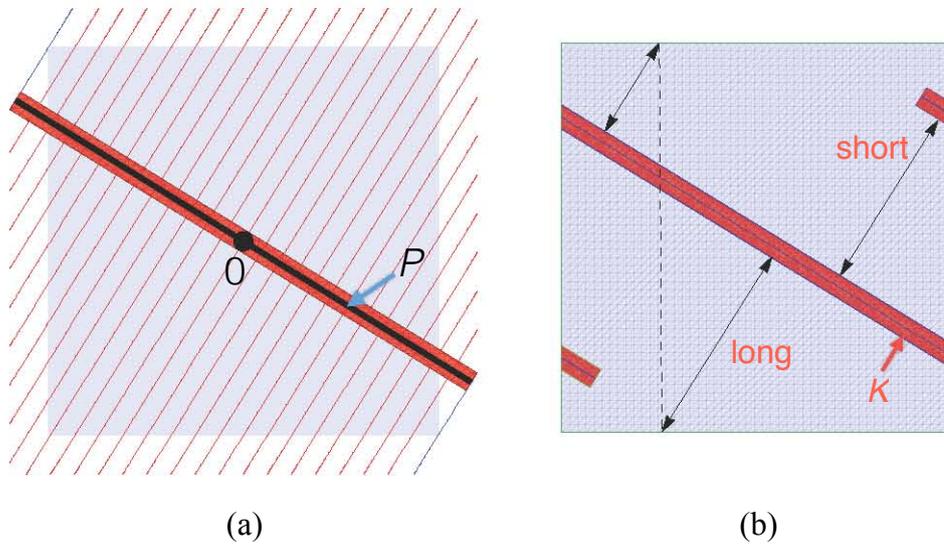


Figura 6.2: Proceso para incrustar un gas de Lorentz cuasiperiódico de dimensión 1 en un billar de dimensión 2. (a) La construcción del conjunto P , proyectando el centro de C sobre todos los planos E_v y su “engruesamiento” al hacer el producto cartesiano por el segmento B . (b) El proceso de periodización del obstáculo P para obtener el obstáculo K y así finalizar la construcción del billar. También se muestran los caminos cortos y largos que se pueden encontrar en este billar.

es decir, agregando un vector $\vec{C}el(t)$ n -dimensional que indica el número de veces que ha cruzado cada cara del cubo en una dirección menos el número de veces que ha cruzado esas mismas caras en dirección contraria. Obteniéndose finalmente la posición como $x(t) = \vec{x}_C(t) + \vec{C}el(t)$, donde $\vec{x}_C(t)$ es la posición de la partícula dentro del cubo al tiempo t .

En este punto vale la pena mencionar que por primera vez se construye un modelo donde, de manera natural, se pueden establecer condiciones iniciales homogéneas para un sistema aperiódico, simplemente distribuyendo de forma homogénea las posiciones iniciales y las velocidades, pues cada rebanada E_v

representa una porción del espacio E al momento de ser desdoblado el sistema.

6.2. Billar 2-dimensional

En esta sección se discutirá el gas de Lorentz unidimensional, donde los obstáculos están situados sobre los vértices de la cadena de Fibonacci. Aunque este caso resulta trivial analizarlo con otros métodos, puesto que no hay difusión, se incluye en esta tesis con fines pedagógicos.

La proyección de un billar 2-dimensional a un gas de Lorentz cuasiperiódico 1-dimensional produce una línea recta con obstáculos separados por dos posibles distancias, las cuales llamaremos L y S recordando lo obtenido sobre la cadena de Fibonacci en el capítulo anterior. En este caso, los obstáculos del gas de Lorentz cuasiperiódico unidimensional son segmentos de recta y la velocidad de las partículas en el gas de Lorentz puede ser -1 o 1 , mientras que el billar en el cual está incrustado es un cuadrado con 3 segmentos de banda atravesada como se muestra en la figura 6.2 (b) y las velocidades de las partículas pueden ser $1/\sqrt{2+\tau}(1, \tau)$ o $1/\sqrt{2+\tau}(-1, -\tau)$.

Con ayuda de la figura 6.3, es fácil mostrar que efectivamente hay sólo dos caminos posibles L y S . Además, es fácil también calcular la probabilidad de que una partícula caiga en uno de los dos caminos, siendo esta el área que ocupan dichos caminos (un rectángulo pequeño de área $A_1 = \tau/(\tau+1)$ y uno grande de área $A_2 = \tau A_1$, donde $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$). Por supuesto en este billar no hay difusión, pues las partículas quedan localizadas como también se puede ver en la figura.

Un modelo similar es un billar N -dimensional que se proyecta a uno 1-

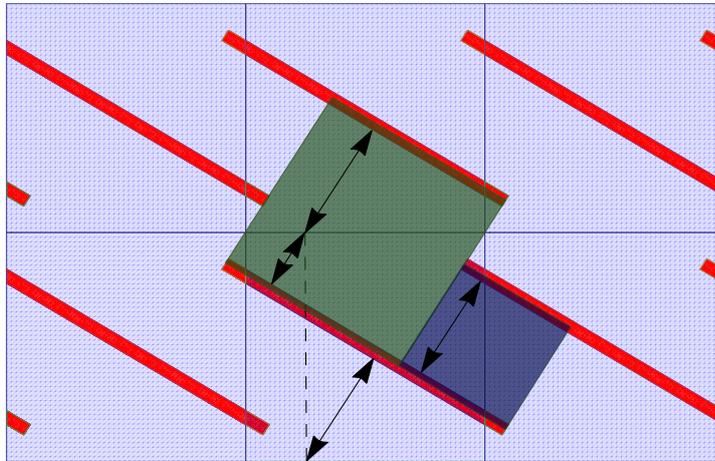


Figura 6.3: Seis celdas contiguas del billar de la figura 6.2. En este caso se puede ver claramente que en verdad los únicos dos posibles tamaños de caminos son efectivamente dos, uno corto (“short”) y uno largo (“long”)



Figura 6.4: Gas de Lorentz unidimensional, que es de hecho la cadena de Fibonacci formada al desdoblar el billar 2-dimensional

dimensional; sin embargo, la estructura del billar se complica bastante como se puede ver en la figura 6.5. En la figura se muestra el caso de un billar 3-dimensional que representa un gas de Lorentz cuasiperiódico unidimensional. En este caso, W es un objeto bidimensional, concretamente, un hexágono y al periodizarse, k se compone de 7 pedazos que son las intersecciones de los 9 hexágonos que se ven en la figura con el cubo del centro. Dos de los hexágonos no intersectan en ningún punto al cubo. El billar sigue sin presentar difusión, pues el hexágono del centro divide al cubo en dos secciones.

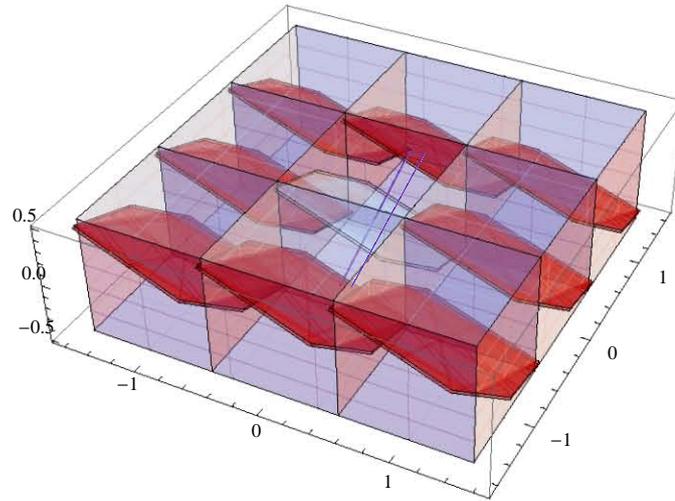


Figura 6.5: Billar 3-dimensional que produce un gas de Lorentz unidimensional. Los hexágonos representan los obstáculos que forman K , mientras que el cilindro representa el espacio E .

6.3. Billar 3-dimensional de un gas de Lorentz

2D

En esta sección se analiza un gas de Lorentz 2D incrustado en un billar periódico 3D. Este caso se vuelve mucho más interesante, puesto que sí permite la difusión de partículas. De hecho, es fácil ver que para cualquier billar cuya proyección sea a una dimensión mayor o igual a 2, será un billar que presente difusión. La razón de ellos es que $E \oplus E^\perp = \mathbb{R}^n$, lo que implica que E^\perp tiene dimensión $n' < n - 2$ y por lo tanto no separa el espacio \mathbb{R}^n en dos secciones, lo que implica que las partículas se difunden para algún radio r suficientemente pequeño de los obstáculos.

El caso concreto del billar 3-dimensional, forma un cubo con tres segmen-

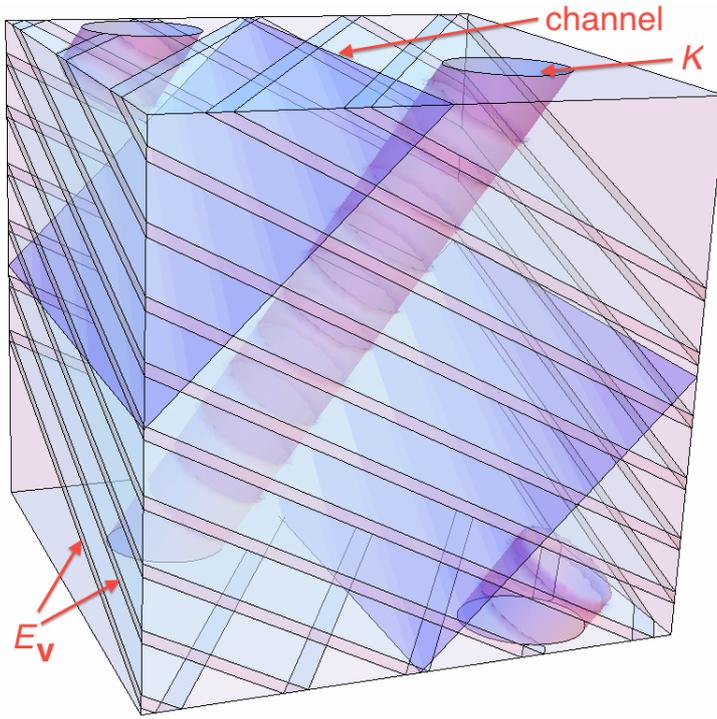


Figura 6.6: Billar 3-dimensional que produce un gas de Lorentz 2-dimensional. También se muestran 3 posibles canales, 2 de ellos correspondientes a las caras no intersectadas por K y el otro como un plano inclinado a 45° .

tos de cilindro, como se muestra en la figura 6.6. No sólo podemos concluir que existe difusión en este billar, sino también que existen canales. Puesto que este billar tiene 4 caras en las cuales los obstáculos del billar no atraviesan, podríamos iniciar en una de esas caras o cualquier plano paralelo a esas caras que no intersecten al obstáculo k . Las partículas están constreñidas a moverse sobre planos paralelos a E , por lo que, al conjugar ambas constricciones, obtenemos una determinada dirección, la cual es el resultado de la intersección de ambos planos (el que contiene a la cara en cuestión y el plano E_v). Dadas las condiciones periódicas a la frontera, la partícula que inicie con esas condiciones,

se quedará siempre en el mismo plano de la cara sin colisionar nunca con el obstáculo K , es decir, la partícula se moverá libremente por tiempo infinito, lo que es exactamente la definición de “Canal” (llamado a veces horizonte principal cuando la dimensión de este es $n - 1$, siendo n la dimensión del gas de Lorentz [98]).

Además de demostrar la existencia de estos canales, también resulta fácil calcular con qué radio del obstáculo se bloquean estos, pues sólo hay que calcular el radio necesario para que el obstáculo intersekte todas las caras.

Se podría argumentar que ello es sólo una condición necesaria para bloquear los canales, pero quizá no suficiente, pues podrían existir otros canales que quedaran sin bloquear. Sin embargo, con un argumento heurístico, es posible rebatir esta crítica. Otros canales deberían estar atravesando el billar de forma diagonal. Si el ángulo en el que atraviesan el billar es de 45° , entonces se trata del caso mostrado en la figura 6.6, que por inspección se puede ver que no es un canal más ancho. Si fuese a otro ángulo, entonces por las condiciones a la frontera cortará en más pedazos el billar y por lo tanto pasará más cerca del eje W .

Esto no es una prueba formal, pero da pie a pensar que, efectivamente, basta con asegurarse que todas las caras del billar han sido intersektadas, para asegurar que todos los canales han sido bloqueados y de hecho, esto mismo parece ser generalizable a más dimensiones, como se verá más adelante.

6.4. Billar 5-dimensional: Gas de Penrose-Lorentz

El modelo anterior es un modelo por demás interesante desde un punto de vista teórico, pues es quizá el único caso que se puede visualizar en el cual se presenta difusión; sin embargo, hasta donde es del conocimiento del autor, no representa ningún modelo de un sistema físico real. Por esta razón es necesario extender el modelo a un caso que se haya revisado con anterioridad y que se encuentre en la naturaleza.

Con esto en mente se estudió un billar 5-dimensional que fuera equivalente al gas de Penrose-Lorentz, es decir, a un gas de Lorentz cuyos obstáculos estuvieran centrados en los vértices de un teselado de Penrose.

Esta clase de arreglo no sólo ha sido estudiado extensamente de forma matemática (por mencionar algunos textos [122, 124, 42, 41, 132]), sino que también se ha encontrado en los patrones de difracción de diversos cuasicristales [8, 65, 6, 66, 16, 67] y fue sobre este arreglo que Szász propuso como un reto el estudio de los gases de Lorentz [40].

Es de esperarse que en un gas de Penrose-Lorentz existan canales, pues lo que se conoce como las decoraciones de Ammann sugieren la existencia de estos de forma implícita para el caso del teselado de Penrose (ver capítulo 5).

En este caso, el hipercubo C , es un hipercubo 5-dimensional, con $2^5 = 32$ vértices. La retícula cuasiperiódica que se obtiene con los vértices del teselado de Penrose, es una retícula de orden rotacional 5, es decir, al rotar el sistema $2\pi/5$ radianes, la retícula queda invariante. Usando este hecho y notando que una rotación adecuada a lo largo de la diagonal que va de $(0, 0, 0, 0, 0)$ a $(1, 1, 1, 1, 1)$ deja invariante el hipercubo, pues dicha rotación puede sólo permutar los 5

vectores de la base \vec{e}_j , ($j = 1, \dots, 5$) de forma cíclica. Con respecto a esta base, la matriz de rotación que cumple esto es:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

Los eigen valores de A son las 5 raíces de la unidad, $1, \xi, \xi^2, \xi^3, \xi^4$, donde $\xi^j = \exp(2\pi i j/5)$, $j = 0, \dots, 4$ y $\xi^3 = \xi^{-2}$, $\xi^4 = \xi^{-1}$.

El único eigenvalor real es 1, los otros son complejos y se pueden agrupar por pares conjugados. Esto significa que el espacio se descompone en dos planos 2-dimensionales que son invariantes ante las rotaciones de orden 5 y ambos planos totalmente irracionales. Ambos planos también son ortogonales al espacio generado por la diagonal del hipercubo.

Los vectores base se proyectan hacia los vértices de un pentágono regular en ambos planos, pero en uno formando un ángulo entre dos vectores adyacentes de $2\pi/5$ y en el otro un ángulo de $4\pi/5$. El primero de los planos lo llamaremos ϵ , y el segundo ϵ' . Definimos entonces $\epsilon^\perp = \epsilon' \oplus \Delta$, donde Δ es el espacio generado por la diagonal del cubo.

Calculando los eigenvectores obtenemos:

$$\vec{v}_j = (1, \xi^j, \xi^{2j}, \xi^{3j}, \xi^{4j}).$$

Notemos que:

$$\vec{w} \cdot \vec{v}_j = 0$$

para $j = 0, \dots, 4$, donde \vec{w} es el vector $(1, 1, 1, 1, 1)$.

Además,

$$\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 = \vec{v}_3 \cdot \vec{v}_4 = \vec{v}_2 \cdot \vec{v}_4 = \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_3 = 0.$$

Por lo tanto, el plano generados por \vec{v}_1 y \vec{v}_4 es ortogonal al plano generado por \vec{v}_2 y \vec{v}_3 y ambos planos son ortogonales a \vec{w} .

Entonces, siendo $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3, \vec{u}_4$ los vectores unitarios paralelos a $\vec{v}_1 + \vec{v}_4, i(\vec{v}_1 - \vec{v}_4), \vec{v}_2 + \vec{v}_3, i(\vec{v}_2 - \vec{v}_3)$ y $\vec{u}_5 = \frac{1}{\sqrt{5}}\vec{w}$, tenemos una base ortonormal de eigenvectores de rotación de orden 5. Respecto de esta base, la matriz de rotación es

$$A' = \begin{pmatrix} \cos(2\pi/5) & -\sin(2\pi/5) & 0 & 0 & 0 \\ \sin(2\pi/5) & \cos(2\pi/5) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(4\pi/5) & -\sin(4\pi/5) & 0 \\ 0 & 0 & \sin(4\pi/5) & \cos(4\pi/5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

Las matrices de proyección Π y Π^\perp se encuentran al reescribir los vectores de la retícula hipercúbica en términos de la base $\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3, \vec{u}_4, \vec{u}_5$, obteniéndose

$$\Pi = \begin{pmatrix} \frac{2\sqrt{2}}{5} & 0 & \frac{2\sqrt{2}}{5} & 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{-1+\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & -\frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{-1-\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & -\frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{-1-\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & -\frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{-1+\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & \frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{-1-\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & \frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{-1+\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & -\frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{-1+\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & \frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{-1-\sqrt{5}}{5\sqrt{2}} & \frac{2}{5}\sqrt{2\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

y

$$\Pi^\perp = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{-1+\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1-\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1-\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1+\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & -\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1-\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1+\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1+\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} & \frac{-1-\sqrt{5}}{4\sqrt{2}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & -\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} + \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} & \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{5}{8} - \frac{\sqrt{5}}{8}\right)} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

Para generar el billar correspondiente, es necesario primero producir la ventana W , la cual es resultado de aplicar la matriz de proyección Π^\perp sobre los vértices de un hipercubo unitario de dimensión 5 y después obtener la envolvente convexa, la cual resulta ser un romboicosahedro, como se muestra en la figura 6.7. Una vez que se tienen las coordenadas de los vértices del romboicosahedro, se hace el producto carteciano entre el romboicosahedro resultante (definido por 20 planos) y el disco duro.

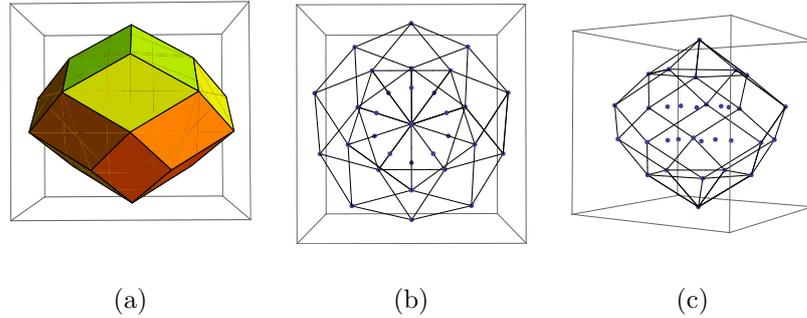


Figura 6.7: Tres vistas del romboicosahedro que se obtiene de proyectar el hipercubo 5-dimensional C en el espacio 3-dimensional E^\perp . (a) La envolvente convexa; (b) y (c) los vértices interiores también.

Al igual que el caso del billar 3-dimensional, algunas de las hipercaras (4-dimensionales) del hipercubo, no son intersectadas por la ventana W , lo que

implica la existencia de canales. Estos canales se bloquean para radios $r > r_c$, donde el radio r_c se puede calcular con el siguiente algoritmo. Se toma un vértice i de W . Se mide la distancia (sobre el plano E) a cada una de las 10 hipercaras del hipercubo C , agrupándolas en caras paralelas, $\text{Cara}_{j,1}$, $\text{Cara}_{j,2}$ con $j = 1, \dots, 5$. Se obtiene $F_{j,i} = \min\{d(\text{vertice}_i, \text{Cara}_{j,1}), d(\text{vertice}_i, \text{Cara}_{j,2})\}$, donde $d(x, \text{Plano})$ es la distancia medida del punto x al plano Plano pasando por el plano E . Se obtiene el máximo de los $F_{j,i}$ $G_i = \max\{F_{j,i}\}$. Finalmente, se obtiene el mínimo de todos los G_i y con ello se obtiene el radio crítico. Con este procedimiento se obtuvo el siguiente resultado: $r_c = L/(2\tau^2)$ con L el lado de los rombos usados en la teselación de Penrose (o bien, uno de los rombos de la ventana W) y $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$.

6.5. Simulaciones numéricas

Para hacer las simulaciones, se usaron, como ya se dijo al inicio de este capítulo, varias construcciones. No se darán detalles de los que resultaron ineficientes, pero sí lo haremos del modelo principal, que es el billar 3-dimensional mencionado antes. Las simulaciones sobre el billar 5-dimensional fueron muy pocas y sólo se usaron para comprobar la existencia de canales, obteniendo la distribución de vuelos libres y observando que este no hay un vuelo máximo cuando hay canales, sino que depende del tiempo que duren las simulaciones, mientras que cuando los canales son bloqueados, hay un máximo en el vuelo libre de las partículas con independencia del tiempo que duren las simulaciones. Sin embargo, debido a lo complejo del billar resulta mucho más eficiente estudiar simulaciones de sistemas como el billar 3-dimensional y por ello se hicieron

la mayor parte de las simulaciones en ese billar.

Para este billar se eligió un plano E , ortogonal al vector $(1/(\tau + 2), \tau/(\tau + 2), \tau/\sqrt{\tau + 2})$, donde $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. Se usaron 10^6 partículas sin interacción entre ellas, distribuídas homogéneamente en los espacios libres del billar 3D (es decir, donde no se encontraba el obstáculo). Para hacer esta distribución, se seleccionó aleatoriamente la posición de cada partícula, constriéndola a estar dentro del cubo. Una vez asignada la posición, se checaba si esta no se encontraba dentro del obstáculo. Si era así, se reasignaba la posición hasta que la partícula estuviera fuera del obstáculo. Una vez que la posición de la partícula quedaba definida, se asignaba una dirección a la velocidad (un ángulo entre 0 y 2π) y se constreñe a moverse en el plano E . Este proceso se dificulta cuando el tamaño del obstáculo es muy grande, pues queda poco espacio libre y es muy probable que las partículas caigan dentro del obstáculo.

Otro detalle que hay que tomar en consideración, es que tras cada colisión de la partícula con el obstáculo, se vuelve a constreñir la velocidad a un plano E_v , haciendo la proyección ortogonal de la velocidad v al plano en cuestión y se vuelve a normalizar la velocidad. Esto se hace para corregir los errores numéricos, que rápidamente se magnifican, pues es importante que la partícula se mueva siempre en planos paralelos a E y que la norma de su velocidad no se modifique (que no haya ni pérdida, ni ganancia de energía).

También es importante aclarar una curiosidad en este caso, que difiere del gas de Penrose–Lorentz. Para este billar en particular, el último de los canales se bloquea sólo después de que los discos se enciman (ver figura 6.8), a diferencia del gas de Penrose–Lorentz, donde al incrementar el tamaño de los discos, primero se bloquean todos los canales y después se enciman los obstáculos. En el caso

del billar 3-dimensional, los obstáculos empiezan a encimarse cuando $r \simeq 0.26$ y a $r_c \simeq 0.3$ los canales son bloqueados.

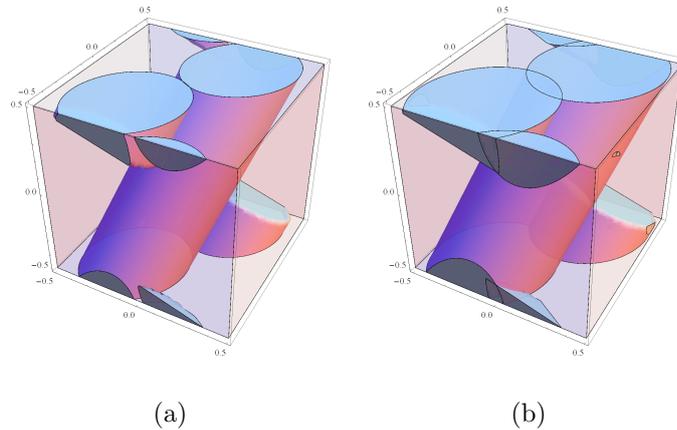


Figura 6.8: El billar 3-dimensional a los dos valores críticos de r ; (a) cuando los obstáculos comienzan a encimarse y (b) cuando los canales quedan bloqueados.

Por último, se debe mencionar que al hacer las simulaciones, es necesario periodizar cada uno de los pedazos que sobresalgan del cubo C y estos incrementan en número al incrementar r , pues se intersectan el resto de las caras. Esto, tanto para el caso 3-dimensional como para el gas de Penrose–Lorentz, resulta una labor demasiado compleja, por lo que en realidad lo que se hizo es hacer un sistema más grande, que incluyera todas las celdas vecinas sin periodizar, lo cual mantiene la misma eficiencia en el programa y es completamente equivalente. Si se simula el caso donde los obstáculos tienen un radio relativamente pequeño, entonces sólo se toman en cuenta dos celdas más, si se simula un sistema donde r es relativamente grande (es decir, ya se intersectaban nuevas caras), se toman en cuenta 10 celdas más. Para el caso 5-dimensional el número de celdas crece a $3^5 = 234$ celdas, y en cada una de las celdas se chequean 20 planos (los cuales se reducen a un número efectivo de 10 planos por las simetrías) para chequear si la

partícula colisionaba o no. Es por esta razón que las simulaciones para el gas de Penrose-Lorentz resultan mucho menos eficientes, más o menos 220 veces menos eficientes.

6.6. Canales

Como se vio en la sección anterior, algunos gases de Lorentz cuasiperiódicos pueden tener canales de dimensión $m - 1$, donde m es la dimensión del espacio donde se mueven las partículas del gas; sin embargo, no hemos probado que esto sea algo que suceda de forma genérica para cualquier gas de Lorentz cuasiperiódico que se pueda construir mediante el método de proyección. En esta sección aremos esta demostración.

Primero notemos que la intersección de una hipercara de dimensión $n - 1$, con el subespacio E de dimensión $m < n$, tiene dimensión $m - 1$, pues E es totalmente irracional, por lo que interseca a las hipercaras de forma transversal. De esta forma, si alguna de las caras no es intersectada por el W , entonces existe al menos un canal (correspondiente a la cara no intersectada) de dimensión $m - 1$.

Por otra parte, debido a la forma en la que se construye W , si W no interseca el plano de la cara en la cara misma, no lo intersectará en otro punto, es decir, W sólo interseca caras en los puntos donde es “periodizada”.

Si W fuera de dimensión 1, entonces, puesto que el hipercubo es un objeto convexo, sólo interseca en 2 puntos, es decir, en 2 de las $2n$ hipercaras. Si W tiene una dimensión $n - m > 1$, recordando que W está contenido en el subespacio lineal E^\perp y ese subespacio lo podemos descomponer en $n - m$ ejes ortogonales entre sí, cada uno de los cuales interseca 2 caras paralelas (pues

cada eje pasa por el centro de C), el objeto que se genera con esos ejes (olvidando la periodización) sólo puede intersectar las caras intersectadas por los ejes, es decir $2n - 2m$ caras. Esto se puede demostrar fácilmente por inducción. Si la dimensión de W es 2, se trata de un plan que pasa por el centro y por inspección, se observa que sólo intersecta 4 caras de C . Supongamos que se cumple para $\dim(E^\perp) = l < n - 1$, probémoslo para $\dim(W) = l + 1$. Como se cumple para $\dim(W) = 2$, cualquier eje que tomemos dentro de un subespacio lineal Ω de E^\perp , con $\dim(\Omega) = l$ y el eje unidimensional Ω^\perp sólo intersectará las caras de ambos ejes, pero como esto sucede para cualquier eje unidimensional de Ω y $E^\perp = \Omega \oplus \Omega^\perp$, entonces E^\perp sólo intersecta las caras que intersectan los ejes que lo generan. De esto se sigue que hay $2m$ caras que no son intersectadas por W . Las caras no intersectadas están agrupadas en pares de caras paralelas, que por las condiciones periódicas a la frontera, implican la existencia de por lo menos m canales en direcciones distintas de dimensión $m - 1$ para obstáculos suficientemente pequeños.

Puesto que hay por lo menos tantos canales como dimensiones tenga el gas de Lorentz cuasiperiódico, es de esperarse que haya súperdifusión, como lo hay en los gases de Lorentz periódicos, para cualquier gas de Lorentz cuasiperiódico, si el radio de los obstáculos es suficientemente pequeño.

6.7. Generalizaciones del modelo

La construcción de este billar, no sólo sirve para estudiar modelos de gas de Lorentz; en realidad, se puede usar siempre y cuando el potencial del obstáculo (y de las partículas) sea de corto alcance y siempre el mismo para cada “obstáculo”.

Si se quisiera estudiar una distribución de obstáculos con diferentes tamaños, entonces el efecto sería que la tangente al obstáculo no sería ortogonal al plano sobre el que se mueve la partícula (quizá incluso no existiría dicho plano tangente) y por lo tanto la trayectoria de la partícula no se mantendría sobre un plano paralelo a E_v . Este problema se puede corregir construyendo el movimiento de la partícula a mantenerse sobre un plano E_v , por ejemplo, tomando sólo la proyección de la velocidad resultante después de la colisión (o desviación) y normalizando la velocidad resultante, tal como se hace en las simulaciones numéricas. Con esta construcción, es posible estudiar también sistemas “imperfectos”, donde los obstáculos no están necesariamente centrados en los vértices de una lattice cuasiperiódica (o periódica), sino ligeramente desviados. En vez de usar un eje W que sea lineal, se puede multiplicar este eje por alguna función no lineal e incluso aleatoria, produciendo un sistema casi-cuasiperiódico. Por otra parte, si el potencial de “corto alcance” tiene un corte no tan pequeño, de forma tal que el potencial sobre salga del bilar periódico, es necesario colocar algunas celdas aledañas, de forma que se incluyan las celdas que podrían influir en la trayectoria de la partícula.

Otra modificación al modelo que se puede hacer, es poner partículas que interactúan entre sí. Siempre y cuando esta interacción se dé mediante un potencial de corto alcance, como el de esferas duras o de esferas suaves, el modelo sigue siendo funcional, aunque la dificultad consiste en colocar las partículas adecuadamente para que realmente interactuen entre ellas. Una posible solución a este problema, es darles un ancho en la dirección perpendicular a los planos sobre los que se mueven las partículas.

Tampoco es útil sólo para estudiar modelos cuasiperiódicos, de hecho, es una

generalización de un modelo periódico. Si el plano E es totalmente racional, entonces lo que se produce es un modelo periódico; sin embargo, en este caso, se debe tener en cuenta que si la distribución de las partículas se realiza de forma homogénea a lo largo de todo C , entonces en realidad lo que se tendrá será un conjunto de sistemas periódicos infinitos, siendo cada uno una copia trasladada del otro. Si las partículas no interactúan entre sí, esto no tiene ningún efecto; no obstante, si hay interacción entre las partículas, se debe cuidar que la distribución de las partículas sea realmente sólo sobre uno de los planos E_v pues de lo contrario se eliminaría la interacción entre partículas, ya que la probabilidad de que 2 partículas pertenezcan al mismo plano E_v (y por lo tanto al mismo sistema), es 0.

Capítulo 7

Resultados numéricos

En este capítulo se mostrarán los resultados de las mediciones numéricas del desplazamiento cuadrático medio y la distribución de vuelos libres en el billar 3-dimensional y en el gas de Penrose–Lorentz, al mismo tiempo que se analizará el origen de las diferencias y similitudes con los casos periódicos y desordenados. Cabe mencionar que los mismos resultados se obtuvieron con los otros métodos (usando el método de deflación y el método dual generalizado para la construcción de la retícula cuasiperiódica), pero para tiempos de 3 órdenes de magnitud más cortos.

7.1. Trayectorias

Antes de pasar a mostrar y analizar los resultados numéricos obtenidos, me parece prudente mostrar algunas imágenes de lo que se estudió en ambos modelos numéricos. Esto con el fin de convencer al lector de que los sistemas estudiados son efectivamente aperiódicos, pero de alguna forma “ordenados”.

En la figura 7.1 se muestra el gas de Penrose–Lorentz obtenido mediante el modelo de billar 5-dimensional, mientras que en la figura 7.2 se muestra el gas de Lorentz cuasiperiódico que se estudia con el modelo de billar 3-dimensional. La primera de las figuras es un caso ya conocido y que sirve simplemente para convencer al lector de que el billar efectivamente reproduce el gas de Penrose–Lorentz. La segunda figura, en cambio, es una clase de gas cuasiperiódico no observada antes, pues de hecho, hasta donde el autor de esta tesis pudo revisar, no existe ningún trabajo donde se muestre la proyección de un espacio 3-dimensional a uno 2-dimensional con el fin de producir un sistema cuasiperiódico mediante el método de proyección.

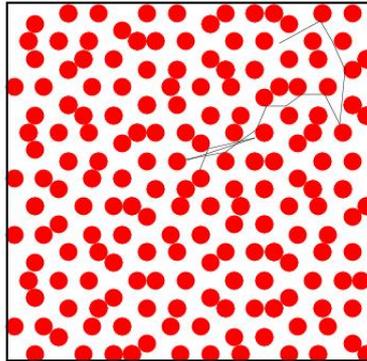


Figura 7.1: Se muestra el resultado de desdoblar los planos E_v en todo el plano E . Se observa que efectivamente el sistema tiene una simetría pentagonal. También se muestra la trayectoria de una partícula.

También resulta interesante observar las trayectorias de las partículas directamente en el gas de Lorentz. En la figura 7.3 se muestran las trayectorias de las partículas dentro de un gas de Penrose–Lorentz. En este caso sólo hay

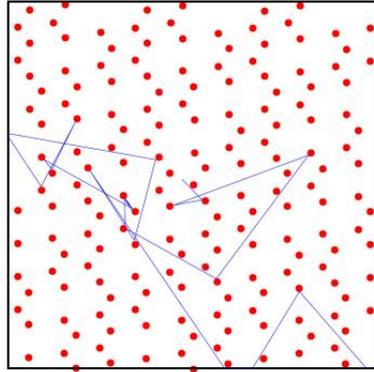


Figura 7.2: Se muestra el resultado de desdoblar los planos E_v en todo el plano E Para el caso del billar 3-dimensional. También se muestra la trayectoria de una partícula.

dos canales, pero es posible ver trayectorias largas en más direcciones, debido al efecto de “canal efectivo”, donde, para tiempos cortos, hay direcciones donde las partículas pueden viajar sin presentar colisiones (más adelante se explicará con más detalle). En la figura 7.4 se muestran las trayectorias en el gas de Lorentz correspondiente al billar 3-dimensional, para el caso donde los canales aún no han sido bloqueados. En este caso, son más o menos claros los tres canales que están abiertos, los cuales corresponden justamente a los canales marcados en la figura 6.6, donde dos de ellos pertenecen a las caras no intersectadas por el obstáculo y uno más debido a un plano que corta el cubo a 45° de inclinación.

Por último, en la figura 7.5 se muestra la trayectoria de una partícula en el gas de Lorentz producido por el billar 3-dimensional, para el caso donde los obstáculos se enciman y forman “cajas” donde las partículas pueden pasar mucho tiempo antes de escapar a una nueva caja. Nótese que el tamaño de las cajas varía, al igual que el número de conexiones que presenta a otras “cajas”.

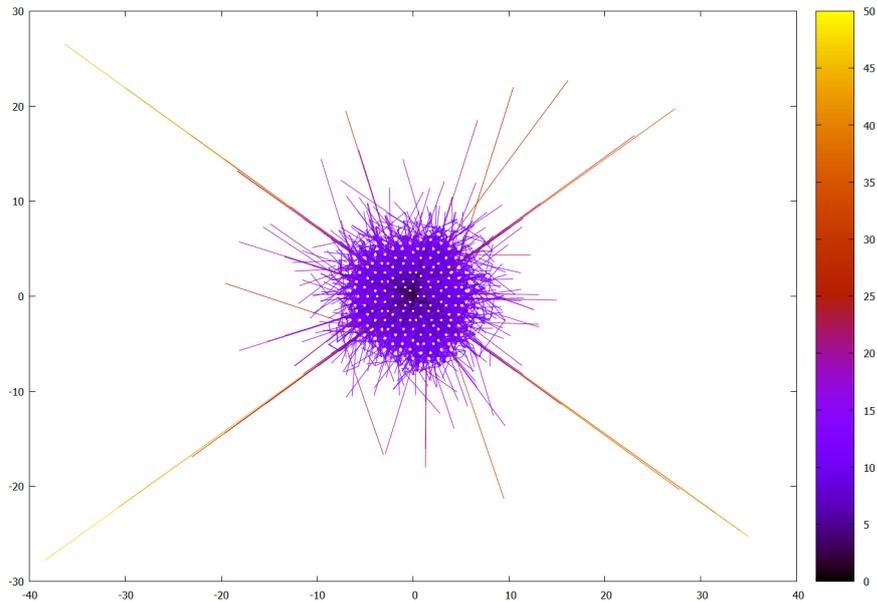


Figura 7.3: Trayectorias en el caso del gas de Penrose–Lorentz, cuando hay canales. Es posible observar una tendencia en las direcciones donde están los dos canales principales.

7.2. Desplazamiento cuadrático medio

Una de las preguntas centrales de esta tesis es ¿Qué clase de difusión presentan los gases de Lorentz cuasiperiódicos? En esta sección se hará un análisis cuidadoso de los resultados obtenidos al respecto de la difusión.

7.3. Obstáculos pequeños

Como se esperaba después del análisis del modelo y observando la existencia de canales, cuando los obstáculos del gas de Lorentz cuasiperiódico son muy pequeños, el sistema debe tener canales y por lo tanto presentar súperdifusión débil (ver ecuación 4.3) como se vio en el capítulo 4, haciendo la analogía con

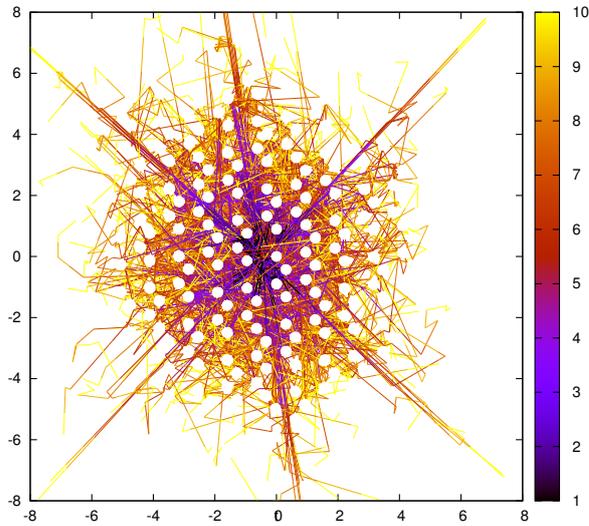


Figura 7.4: Trayectorias en el caso del gas de Lorentz que se obtiene del billar 3-dimensional para el caso cuando hay canales. Es posible observar claramente los canales donde las partículas pueden moverse libremente.

los sistemas periódicos de horizonte infinito.

Para ver si se trata de un sistema súperdifusivo o un sistema con difusión normal, podríamos graficar el desplazamiento cuadrático medio contra el tiempo. Sin embargo, este análisis resulta poco claro cuando la superdifusión es “débil” [110].

Para poder observar mejor el comportamiento del sistema y sabiendo que lo que queremos es discernir si se trata de un sistema súperdifusivo o uno que presente difusión normal, conviene dividir el desplazamiento cuadrático medio por el tiempo, de tal forma que si se trata de un sistema con difusión normal, lo que observemos sea $\langle x^2 \rangle / t \sim D$ que converge a una constante en el límite de tiempos largos $t \rightarrow \infty$. Si, en cambio, se tratara de un sistema súperdifusivo, como el de la ecuación (4.3), se vería una función creciente, pues $\langle x^2 \rangle / t \sim$

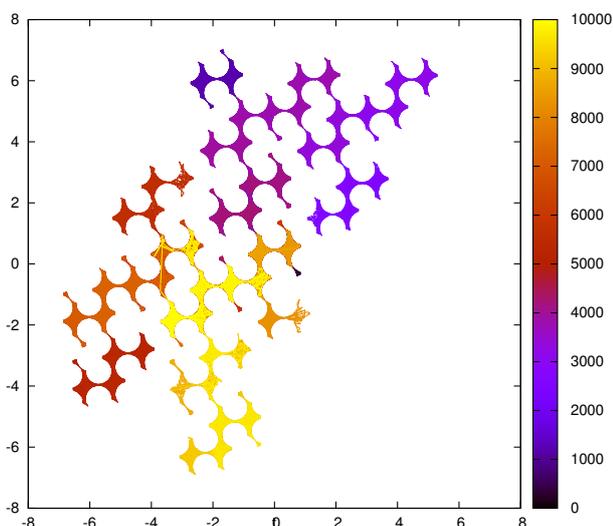


Figura 7.5: Trayectoria de una partícula en el caso del gas de Lorentz que se obtiene del billar 3-dimensional para el caso cuando los discos se enciman produciendo “cajas” donde las partículas pasan mucho tiempo atrapadas. Estas “cajas” son de tamaños diversos.

$D \log(t)$. Más aún, si graficamos usando una escala semilogarítmica, se debería de ver una recta con pendiente positiva para tiempos largos [110].

En la figura 7.6 se muestra una gráfica para diferentes valores del radio r de los obstáculos, del desplazamiento cuadrático medio dividido por el tiempo, contra el tiempo, en escala semilogarítmica. Se puede ver que efectivamente, para radios muy pequeños, el comportamiento es súperdifusivo, tal como en la ecuación (4.3); sin embargo, es aún menos evidente que en el caso cristalino reportado en la literatura [110] que este comportamiento se mantenga cuando el radio crece. Podría tratarse de una convergencia muy lenta, pero también podría tratarse de una situación nueva.

Este resultado nos obliga a hacer un análisis más profundo del modelo y tra-

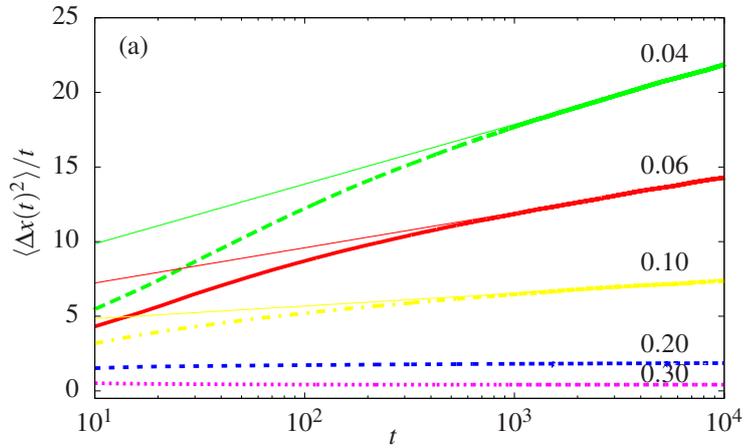


Figura 7.6: Desplazamiento cuadrático medio dividido por el tiempo contra el tiempo, en el caso del gas de Lorentz que se obtiene del billar 3-dimensional para varios radios. La gráfica se presenta en escala semilogarítmica.

tar de entender las diferencias entre un sistema periódico y uno cuasiperiódico.

7.4. Canales efectivos

El análisis de esta sección se basa en el hecho de que el coeficiente de súper-difusión depende, en el caso periódico, del ancho de los canales [98], de forma tal que si los canales tienen un ancho mayor, el coeficiente de súper difusión, será mayor.

Pensemos que el plano E fuera totalmente racional. Entonces, las partículas que viajan dentro de un canal (y en la dirección de este), estarían constreñidas a moverse en, por ejemplo, una de las caras. Debido a la racionalidad del plano E (o la periodicidad del gas de Lorentz), la trayectoria total de la partícula se podría representar con un número finito de segmentos de recta contenidos en la cara de C sobre la cual se mueve la partícula, tal como se muestra en la

figura 7.7 (a). Si incrementamos el tamaño de los obstáculos, en algún momento este intersectará la cara sobre la cual se mueve la partícula. Esto se traducirá en un obstáculo dentro del plano que contiene a la cara sobre la cual se mueve la partícula (figura 7.7 (b)). Inicialmente el obstáculo no necesariamente intersecta la trayectoria de la partícula, en cuyo caso sigue existiendo un canal. Si el obstáculo sigue creciendo, en algún momento intersectará la trayectoria de la partícula en cuestión; en ese punto, súbitamente el tamaño del camino libre de la partícula pasará de infinito a un número finito y relativamente pequeño, de hecho un tamaño ligeramente menor al de la longitud de los segmentos que representan la trayectoria (en la figura 7.7, es el tamaño de 2 segmentos, que en suma miden $2\sqrt{1.25}$). Este mismo efecto pasa si en vez de crecer el obstáculo, recorremos el plano sobre el que se mueve la partícula, de una cara del cubo, a un plano paralelo a esa cara, pero más cercano al centro del cubo, donde está el obstáculo. Se puede saber entonces si las partículas están o no en un canal, simplemente observando la distancia que recorren sin colisionar. Si las partículas recorren una distancia mayor a cierta distancia crítica, significa que se encuentran dentro de un canal. Esta distancia está íntimamente relacionada con el espaciamiento entre los obstáculos en el arreglo periódico.

En el caso cuasiperiódico, E es totalmente irracional y por lo tanto, la trayectoria de una de las partículas que esté constreñida a moverse a lo largo de una de las caras llenará densamente esta cara. Al recorrer el plano sobre el que se mueve la partícula, como se hizo para el caso periódico, en algún momento el obstáculo intersecta el plano, primero en un solo punto y poco a poco, el obstáculo cubre más superficie. En la figura 7.8 se representa esta situación. La figura 7.8 representa un canal y puesto que E es totalmente irracional, en este

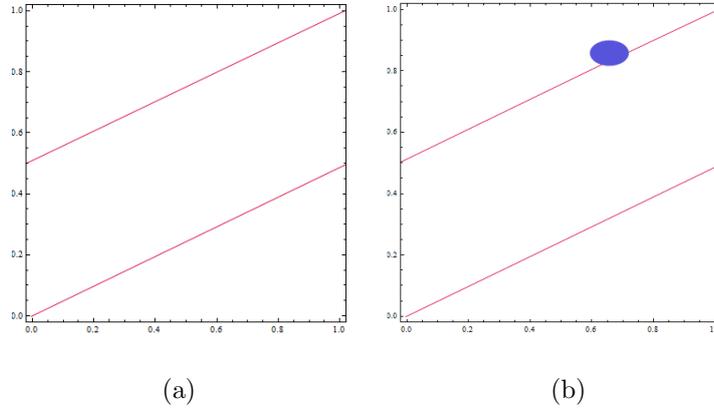


Figura 7.7: (a) Trayectorias de una partícula constreñida a moverse en una de las caras en el caso en el que el plano E es totalmente racional, la cual representa la trayectoria en un canal. (b) Trayectoria de una partícula constreñida a moverse en un plano paralelo a una de las caras, pero donde ya hay la intersección con el obstáculo.

caso la trayectoria cubre densamente el plano, por lo que se ve completamente gris. En la figura 7.8 (b) se muestra el caso cuando el obstáculo intersecta el plano, en este caso la trayectoria es finita y por lo tanto no cubre densamente el plano. La diferencia con el caso periódico es que el cambio entre una trayectoria de movimiento libre infinita a una trayectoria de movimiento libre finito no es súbito; al contrario existen, trayectorias finitas fuera de los canales tan largas como se quiera, incluso para el radio $r = r_c$ en donde todos los canales están bloqueados. Entonces, para tiempos finitos (computacionales), aún en planos donde se intersecta al obstáculo, el comportamiento de las partículas será equivalente a si estuvieran en un canal. Esto produce un ancho “efectivo” del canal (ver figura 7.9), que depende del tiempo de simulación, alcanzándose el ancho real sólo para tiempos infinitos. Como efecto, el coeficiente de súper difusión depende también del tiempo como una función decreciente cuyo límite es D ,

una constante real positiva.

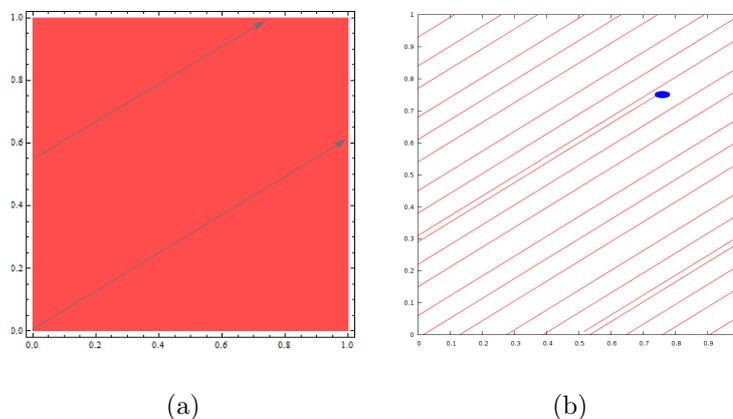


Figura 7.8: (a) Trayectoria de una partícula constreñida a moverse en una de las caras en el caso en el que el plano E es totalmente irracional, la cual representa la trayectoria en un canal. (b) Trayectoria de una partícula constreñida a moverse en un plano paralelo a una de las caras, pero donde ya hay la intersección con el obstáculo

Este mismo análisis nos permite también entender por qué es más difícil observar este tipo de súperdifusión cuando los obstáculos tienen un radio cercano a r_c , pues en ese caso el tamaño del canal efectivo se reduce rápidamente con el tiempo, modificando el valor de D de forma sustancial, excepto para tiempos extremadamente largos. Además, una vez que los canales son bloqueados, el comportamiento debería ser de difusión normal, pero ¿cómo se da la transición? En el caso cristalino la transición nuevamente se da de forma “abrupta”, más o menos notoria, pues los canales desaparecen y los vuelos libres quedan acotados por una cantidad finita y pequeña. En el caso cuasicristalino, la situación es diferente. Justo cuando $r = r_c$, ya no existen canales, por lo que el coeficiente de súperdifusión es $D = 0$; sin embargo, para tiempos finitos (arbitrariamente largos), el sistema sigue teniendo un canal y por lo tanto, el comportamiento

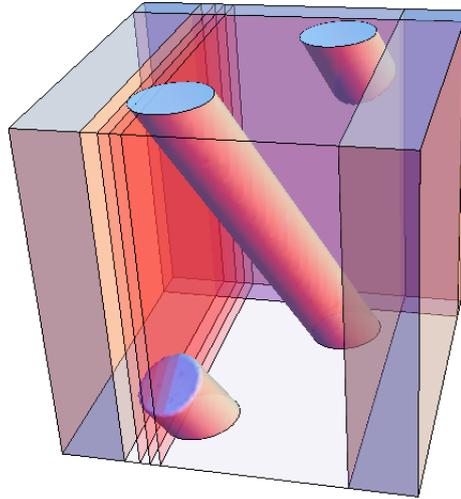


Figura 7.9: Cómo se obtienen los canales efectivos considerando el tiempo de medición del desplazamiento cuadrático medio.

es el de un sistema súperdifusivo. Entre más crecen los obstáculos, los canales “efectivos” tendrán una duración cada vez más corta, de forma que la difusión normal se encuentre cada vez más rápido; sin embargo, a diferencia del caso cristalino, el sistema puede permitir que los obstáculos se encimen, sin que ello produzca la localización de las partículas. Cuando esto sucede, aparece un nuevo efecto que se verá en la siguiente sección.

7.5. Obstáculos encimados

En la figura 7.10 se muestra una gráfica del desplazamiento cuadrático medio dividido por el tiempo contra el tiempo, en escala logarítmica para el caso donde los obstáculos se enciman. Se puede ver que, cuando menos inicialmente, el sistema presenta subdifusión y de hecho, si el radio es muy cercano al radio máximo antes de que el sistema se vuelva localizado r_{max} , el efecto de

subdifusión dura cada vez más tiempo. Este efecto se ha encontrado en sistemas desordenados [133, 107, 83] y se ha explicado debido a que existen “cajas” arbitrariamente largas, donde las partículas pasan tiempos arbitrariamente largos sin presentar difusión.

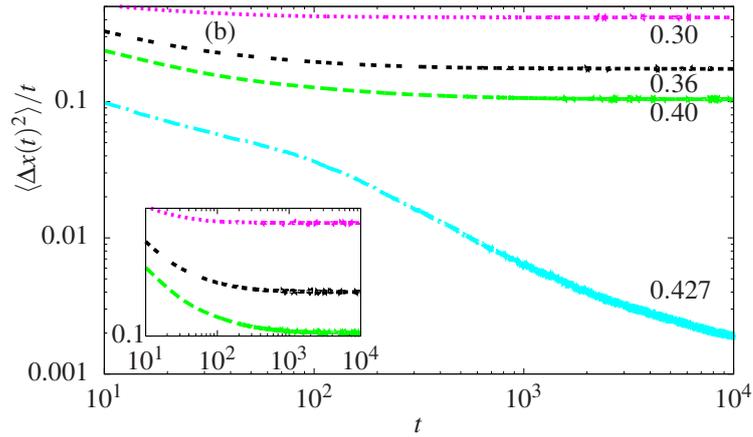


Figura 7.10: Desplazamiento cuadrático medio dividido por el tiempo contra el tiempo, en escala logarítmica para el caso donde los obstáculos se enciman.

7.6. Camino libre

Con el fin de comprobar la existencia de canales, se midió la densidad de vuelos libres (“free paths”), tanto para el caso del gas de Penrose–Lorentz, como para el caso del billar 3-dimensional. La calidad de las mediciones en el caso del gas de Penrose–Lorentz es muy baja; sin embargo, es suficiente para poder notar que efectivamente los vuelos libres están o no acotados observando el tamaño máximo de los vuelos libres.

En la figura 7.11, se muestra una gráfica de la densidad de vuelos libres medios para un caso donde aún los canales no se bloquean en el gas de Penrose–

Lorentz. Como se puede ver, aunque la distancia que recorren las partículas no es muy grande, es posible observar partículas que recorren una distancia larga.

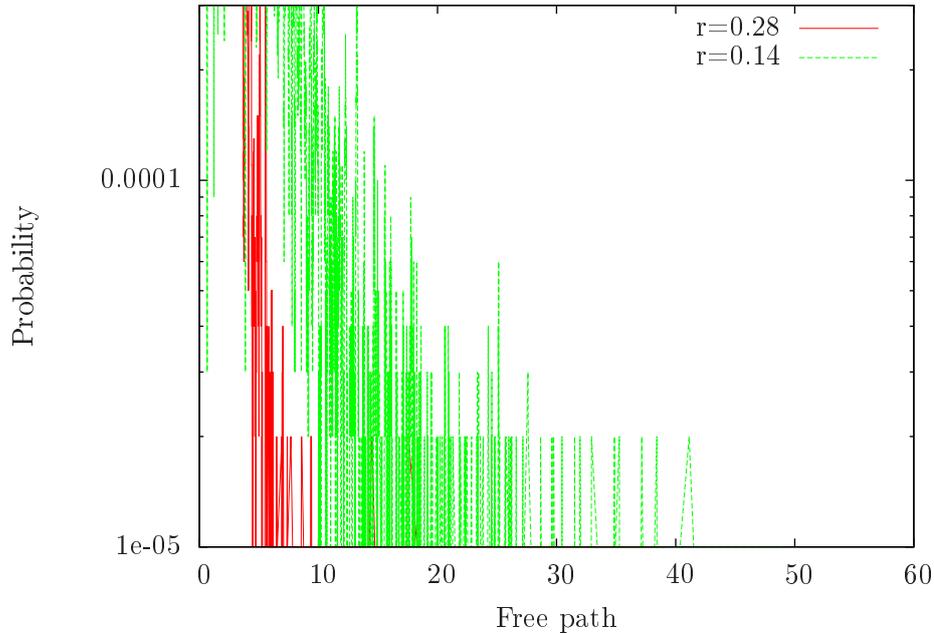


Figura 7.11: Densidad de los vuelos libres para un caso donde aún los canales no se bloquean en el gas de Penrose–Lorentz.

Lo mismo se muestra en la figura 7.12 pero para el caso del billar 3-dimensional. Aquí es posible observar mucho mejor el comportamiento de la curva de densidad, notando que se trata de una ley de potencias, lo cual coincide con los resultados de [103] para un gas de Lorentz periódico y de [48, 109] para un gas de Lorentz cuasiperiódico en el límite de Grad–Boltzman.

En la figura 7.13 y la figura 7.14 se muestran las densidades de los vuelos libres cuando los canales son bloqueados, tanto para el gas de Penrose–Lorentz, como para el billar 3D. En este caso, el tipo de densidad cambia radicalmente y se observa que existe un tamaño límite de camino libre.

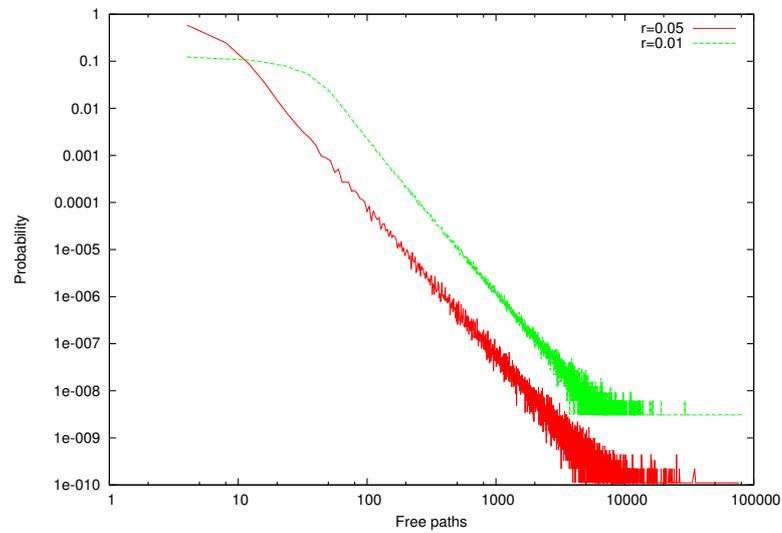


Figura 7.12: Densidad de vuelos libres para un caso donde aún los canales no se bloquean en el gas de Lorentz formado a partir del billar 3-dimensional.

Ambos resultados están acordes con lo esperado y sirven como una prueba más sobre la existencia de canales en gases de Lorentz cuasiperiódicos.

En la figura 7.15 se muestra la evolución con el tiempo de la distribución de las partículas con respecto a sus posiciones iniciales. Es notorio que lo que se obtiene resulta en una distribución tipo gaussiana, tal como sucede en el caso cristalino[102]. También, como era de esperarse, el tipo de estructura fina es similar al encontrado en [102].

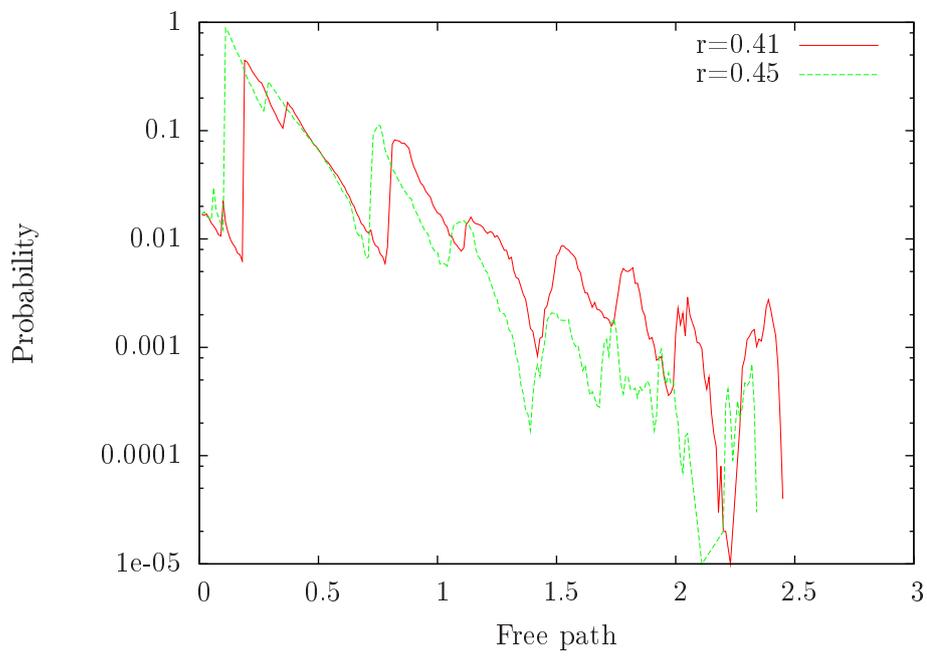


Figura 7.13: Densidad de vuelo libres para un caso donde los canales ya se bloquean en el gas de Penrose–Lorentz.

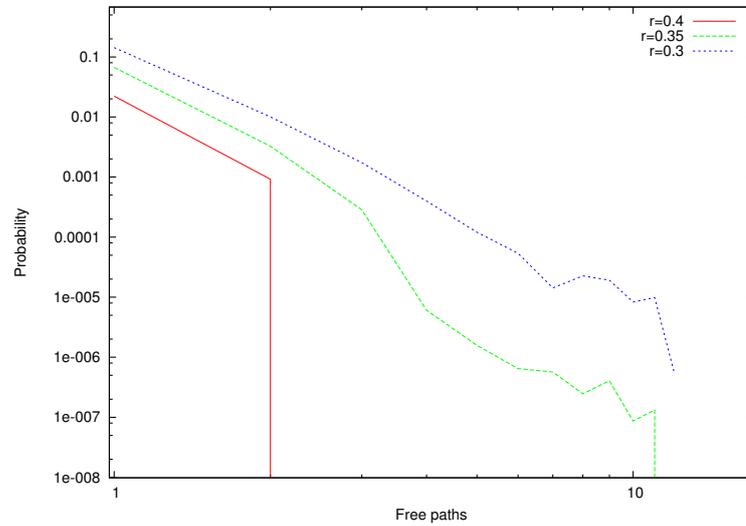


Figura 7.14: Densidad de vuelos libres para un caso donde los canales ya se bloquean en el gas de formado a partir de l billar 3-dimensional. En $r = r_{max} \simeq 0.3$ el comportamiento es intermedio entre el caso donde los canales no están bloqueados y donde sí lo están.

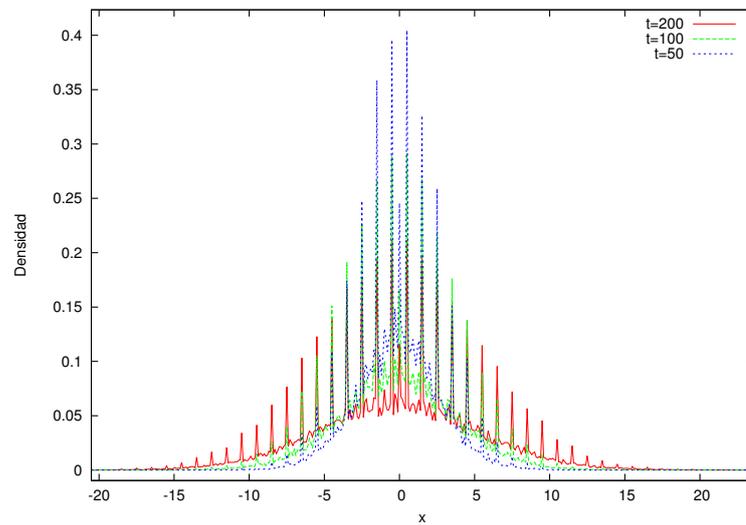


Figura 7.15: Evolución con el tiempo de la distribución de las partículas con respecto a sus posiciones iniciales.

Capítulo 8

Conclusiones

8.1. Conclusiones

Durante el desarrollo de esta investigación se creó una construcción de billar en dimensiones altas, el cual sirvió exitosamente para estudiar las propiedades difusivas de un sistema cuasiperiódico. Este modelo no sólo fue útil para llevar a cabo simulaciones numéricas, sino también para hacer un estudio analítico genérico de los gases de Lorentz cuasiperiódicos. Aunado a esto, el modelo presenta un ejemplo de sistema “localmente finito”, sistemas que tienen propiedades matemáticas poco comunes. Así, el billar que aquí se presentó, es interesante no sólo desde un punto de vista físico, sino también desde un punto de vista matemático.

Se demostró la existencia en gases de Lorentz cuasiperiódicos de al menos m canales de dimensión $m - 1$, donde m es la dimensión del gas de Lorentz cuasiperiódico. Ello sirvió para explicar el comportamiento difusivo de estos sistemas cuando el tamaño de los obstáculos es pequeño.

Se sabe que los cuasicristales presentan algunas características propias de los sistemas periódicos, pero también algunas de los sistemas desordenados. Con este modelo fue posible demostrar en el capítulo 6 y en el capítulo 7 que en lo que se refiere a las propiedades difusivas, los sistemas cuasiperiódicos pueden efectivamente presentar características de los sistemas periódicos, así como de los sistemas desordenados. Características que antes se creían propias de cada uno de esos sistemas. Se respondió concretamente a la pregunta ¿Qué tipo de difusión presentan los gases de Lorentz cuasiperiódicos? encontrándose que pueden presentar 3 regímenes, uno donde se observa súperdifusión, como en el caso de los sistemas periódicos cuando los obstáculos son muy pequeños, uno donde se presenta difusión normal (como un caso intermedio) y otro, cuando los obstáculos se enciman, donde para tiempos finitos se observa subdifusión, como en el caso de los sistemas desordenados, para el caso de obstáculos grandes.

Estos resultados nos llevan a recordar que previo a una transición vítrea en un sistema de esferas duras con esferas de dos diferentes tamaños, se presenta subdifusión de las esferas pequeñas [83], lo cual hasta ahora se cree único de sistemas que presenten transición vítrea. El hecho de que ese mismo tipo de subdifusión se presente en sistemas cuasiperiódicos podría darnos una pista de cuáles son las condiciones necesarias para producir una transición vítrea y también una transición de fase cuasicristalina.

Por otra parte, esto sugiere que las propiedades difusivas dentro de los cuasicristales presentarán características similares a los cristales cuando lo que se difunda interactúe poco con los átomos. Por ejemplo, es de esperarse que aplicando un potencial eléctrico al gas de Lorentz cuasicristalino, se pueda encontrar un régimen súperconductor, como el encontrado en [89] para gases de Lorentz

periódicos. Bajo la misma idea, podríamos pensar que es posible encontrar una transición a la súperconductividad en cuasicristales, tal como sucede en sistemas cristalinos. En cambio, es de esperarse que cuando las interacciones entre las moléculas del cuasicristal y las partículas que se difunden sean interacciones fuertes (como cuando se aplica un potencial eléctrico pequeño a temperatura ambiente), las propiedades difusivas del material se parecerán más a las de un material vítreo, tal como se ha medido en [8].

Con este trabajo se da un método para producir condiciones iniciales homogéneas en los sistemas cuasiperiódicos, lo cual resulta en general una dificultad para sistemas aperiódicos. De la misma forma, se resolvió el problema de la falta de condiciones periódicas a la frontera al estudiar sistemas cuasicristalinos.

8.2. Trabajos futuros

Este nuevo modelo de billar abre una gama de posibilidades de investigación, de las cuales algunas ya están en vías de ser desarrolladas, mientras que otras son tan solo proposiciones a investigarse:

- Resolver si efectivamente el tipo de exponentes que se presentan cuando hay subdifusión en los gases de Lorentz cuasiperiódicos es el mismo tipo de exponentes que se presentan para el caso desordenado. Esta cuestión fue planteada por Jürgen Horbach, de la Universidad de Düsseldorf, Alemania.
- Estudiar gases de Lorentz cuasiperiódicos, pero donde las partículas no son puntuales, sino que tiene un tamaño pequeño, lo que haría que las partículas interactuaran entre ellas. Esto es con el fin de aproximar un gas de esferas duras, donde algunas de las partículas están fijas en determina-

das posiciones. Un caso similar se ha estudiado para sistemas desordenados [74] y ello está relacionado con la transición vítrea. Sería interesante entonces estudiar qué sucede en el caso cuasiperiódico. Por supuesto, la complicación con este modelo es el cómo producir una densidad de partículas mayor a 0, pues en principio, el billar condensa todo el espacio, por lo que poner sólo algunas partículas (y no una cantidad infinita), generaría una densidad 0 de partículas.

- Estudiar gases de Lorentz cuasiperiódicos donde las partículas tienen un potencial de esfera suave¹. Los resultados previos muestran un efecto súperdifusivo cuando el número de partículas es suficientemente grande. Aquí la complicación es similar a la del punto anterior.
- Introducir un potencial eléctrico en alguna dirección y poner partículas cargadas con obstáculos termalizados para observar la resistividad. Esto con el fin de observar si en verdad se mantienen los mismos resultados obtenidos en [89] para el caso cuasiperiódico.
- Investigar si hay efectos sobre los coeficientes de súperdifusión cuando la dimensión del billar se incrementa. Observando los resultados encontrados por Dettmann en [98], inmediatamente surge la pregunta de si la dimensión del billar influirá en los coeficientes de difusión. En este caso, las posibilidades son dos: (i) estudiar gases cuasiperiódicos bidimensionales, pero cuyo billar se encuentre en altas dimensiones; (ii) estudiar gases cuasiperiódicos en altas dimensiones. Si fuese suficiente con estudiar billares en altas dimensiones, entonces se podrían encontrar ejemplos en un espacio 2-

¹Esto actualmente se estudia en la universidad de Düsseldorf por el grupo de trabajo de Jürgen Horbach.

dimensional o 3-dimensional, donde hubiera efectos propios a sistemas de altas dimensiones. Quizá entonces, cuasicristales de alta simetría, tendrían propiedades difusivas diferentes a los cuasicristales de baja simetría.

- Generalizar el modelo a sistemas con potenciales de largo alcance. Aunque el modelo ya es bastante general, hasta este punto, dada la forma en la que se construyen estos billares, no es posible introducir potenciales de largo alcance. Esta dificultad normalmente se resuelve usando la aproximación de amarre fuerte, pero existen varios sistemas donde las interacciones entre moléculas y partículas son de largo alcance. Sería entonces deseable extender el modelo a un sistema que permitiera potenciales de largo alcance.
- Generalizar el modelo a sistemas cuánticos. Si en vez de partículas usamos ondas, el sistema deja de ser funcional; sin embargo, la mayoría de los modelos moleculares actuales utilizan la mecánica cuántica en sus desarrollos, pues es mucho más realista y algunos efectos son sólo posibles estudiarlos con mediante modelos cuánticos. Por otra parte, el hecho de tener un modelo cuántico y periódico permite el uso del teorema de Bloch lo cual podría dar una versión generalizada de dicho teorema.

Bibliografía

- [1] P. S. Salmon, “Amorphous materials: Order within disorder,” *Nature materials*, vol. 1, no. 2, pp. 87–88, 2002.
- [2] R. J. Haiüy, *Tableau comparatif des résultats de la cristallographie et de l’analyse chimique, relativement à la classification des minéraux*. Culture et civilisation, 1809.
- [3] E. Fedorov, “The symmetry of regular systems of figures,” *Zap. Mineralog. Obsc.(2)*, vol. 28, pp. 1–146, 1891.
- [4] Fujiwara, T. Ishii, and Yasushi., *Quasicrystals, Handbook of Metal Physics*. Amsterdam : Elsevier, 2008.
- [5] A. Bilusic, Z. Budrovic, A. Smontara, J. Dolinsek, P. Canfield, and I. Fisher, “Transport properties of icosahedral quasicrystal $\text{Al}_{72}\text{Pd}_{19.5}\text{Mn}_{8.5}$,” *J. Alloys and Compounds*, vol. 342, no. 1–2, pp. 413 – 415, 2002.
- [6] N. Wanderka, M.-P. Macht, M. Seidel, and S. Mechler, “Formation of quasicrystals in $\text{Zr}_{46.8}\text{Ti}_{8.2}\text{Cu}_{7.5}\text{Ni}_{10}\text{Be}_{27.5}$ bulk glass,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 27, pp. 3935–3937, 2000.

- [7] A. Yavari, A. Inoue, T. Zhang, W. B. F., and A. Kvick, “Metastable phases, quasicrystals and solid solutions in zr-based bulk glass-forming alloys,” *Scripta Mater*, vol. 44, p. 1239–1244, 2001.
- [8] T. Zumdly, H. Mehrer, K. Freitag, M. Wollgarten, N. Tamura, and K. Urban, “Diffusion of ^{54}Mn and ^{59}Fe in icosahedral al-pd-mn single quasicrystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. R6815–R6818, Sep 1996.
- [9] “The nobel prize in chemistry 2011.” Nobelprize.org, 24 May 2013.
- [10] I. Fisher, Z. Islam, A. Panchula, K. Cheon, M. Kramer, P. Canfield, and A. Goldman, “Growth of large-grain r-mg-zn quasicrystals from the ternary melt (r= y, er, ho, dy and tb),” *Philosophical Magazine B*, vol. 77, no. 6, pp. 1601–1615, 1998.
- [11] J. Pérez-Mato, G. Chapuis, M. Farkas-Jahnke, M. Senechal, and W. Steurer, “Ad interim commission on aperiodic crystals, international union of crystallography, report of the executive committee for 1991,” *Acta Crystallogr. A*, vol. 48, pp. 922–946, 1992.
- [12] C. F. Brown, *The Physics of Solids*. WA Benjamin, 1966.
- [13] C. Kittel, *Introducción a la física del estado sólido*. Editorial Reverté S. A., 1997.
- [14] D. Wales, *Energy Landscapes*. Cambridge University Press, 2003.
- [15] R. C. Plumb, “Antique windowpanes and the flow of supercooled liquids,” *Journal of Chemical Education*, vol. 66, no. 12, p. 994, 1989.

- [16] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, “Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pp. 1951–1954, 1984.
- [17] L. Bindi, J. M. Eiler, Y. Guan, L. S. Hollister, G. MacPherson, P. J. Steinhardt, and N. Yao, “Evidence for the extraterrestrial origin of a natural quasicrystal,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 109, no. 5, pp. 1396–1401, 2012.
- [18] L. Bindi, P. J. Steinhardt, N. Yao, and P. J. Lu, “Natural quasicrystals,” *science*, vol. 324, no. 5932, pp. 1306–1309, 2009.
- [19] R. R. M., “Undecidability and nonperiodicity for tilings of the plane,” *Inventiones mathematicae*, vol. 12.3, pp. 177–209, 1971.
- [20] L. Guidoni, B. Dépret, A. di Stefano, and P. Verkerk, “Atomic diffusion in an optical quasicrystal with five-fold symmetry,” *Phys. Rev. A*, vol. 60, pp. R4233–R4236, Dec 1999.
- [21] A. Haji-Akbari, M. Engel, A. S. Keys, X. Zheng, R. G. Petschek, P. Palffy-Muhoray, and S. C. Glotzer, “Disordered, quasicrystalline and crystalline phases of densely packed tetrahedra,” *Nature*, vol. 462, pp. 773–777, 2009.
- [22] Y. Ishii, “Phason softening and structural transitions in icosahedral quasicrystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 45, pp. 5228–5239, 1992.
- [23] J. C. Johnston, N. Kastelowitz, and V. Molinero, “Liquid to quasicrystal transition in bilayer water,” *The Journal of chemical physics*, vol. 133, p. 154516, 2010.

- [24] Z. Papadopolos, P. Pleasants, G. Kasner, V. Fournée, C. J. Jenks, J. Ledieu, and R. McGrath, “Maximum density rule for bulk terminations of quasicrystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 69, p. 224201, 2004.
- [25] S. Hocker, F. Gähler, and P. Brommer, “Molecular dynamics simulation of aluminium diffusion in decagonal quasicrystals,” *Philosophical Magazine*, vol. 86, no. 6-8, pp. 1051–1057, 2006.
- [26] H. M. Cataldo, “Stability of a hard-sphere binary quasicrystal,” *Philosophical Magazine*, vol. 10, p. 1603 — 1613, 1999.
- [27] H. Cataldo and C. Tejero, “Stability of the hard-sphere icosahedral quasilattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 13269–13274, 1995.
- [28] J. C. Phillips and D. M., “Structural relaxation in an equilibrium quasicrystal,” *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 397, pp. 192–193, 1995.
- [29] L. Dal Negro, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi, P. Johnson, A. Lagendijk, R. Righini, M. Colocci, and D. S. Wiersma, “Light transport through the band-edge states of fibonacci quasicrystals,” *Physical review letters*, vol. 90, no. 5, p. 055501, 2003.
- [30] Z. V. Vardeny, A. Nahata, and A. Agrawal, “Optics of photonic quasicrystals,” *Nature Photonics*, vol. 7, no. 3, pp. 177–187, 2013.
- [31] K. Giannò, A. Sologubenko, M. Chernikov, H. Ott, I. Fisher, and P. Canfield, “Electrical resistivity, thermopower, and thermal conductivity of single grained (y, tb, ho, er)-mg-zn icosahedral quasicrystals,” *Materials Science and Engineering: A*, vol. 294–296, no. 0, pp. 715 – 718, 2000.

- [32] H. Mehrer and R. Galler, “Vacancy-mediated diffusion in quasicrystalline alloys,” *J. Alloys and Compounds*, vol. 342, no. 1–2, pp. 296 – 301, 2002.
- [33] F. Samavat, M. Gladys, C. Jenks, T. Lograsso, B. King, and D. O’Connor, “Surface layer self diffusion in icosahedral al–pd–mn quasicrystals,” *Surface Science*, vol. 601, no. 24, pp. 5678 – 5682, 2007.
- [34] H. Nakajima and T. Zumkley, “Diffusion in quasicrystals,” *Defect and Diffusion Forum*, vol. 194-199, pp. 789–800, 2001.
- [35] X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu, V. Percec, A. E. Dulcey, and J. K. Hobbs, “Supramolecular dendritic liquid quasicrystals,” *Nature*, vol. 428, no. 6979, pp. 157–160, 2004.
- [36] X. Zeng, “Liquid quasicrystals,” *Current opinion in colloid & interface science*, vol. 9, no. 6, pp. 384–389, 2005.
- [37] K. Hayashida, T. Dotera, A. Takano, and Y. Matsushita, “Polymeric quasicrystal: Mesoscopic quasicrystalline tiling in abc star polymers,” *Physical review letters*, vol. 98, no. 19, p. 195502, 2007.
- [38] D. V. Talapin, E. V. Shevchenko, M. I. Bodnarchuk, X. Ye, J. Chen, and C. B. Murray, “Quasicrystalline order in self-assembled binary nanoparticle superlattices,” *Nature*, vol. 461, no. 7266, pp. 964–967, 2009.
- [39] O. Konevtsova, S. Rochal, and V. Lorman, “Chiral quasicrystalline order and dodecahedral geometry in exceptional families of viruses,” *Physical Review Letters*, vol. 108, no. 3, p. 038102, 2012.
- [40] D. Szász, “Some challenges in the theory of (semi)-dispersing billiards,” *Nonlinearity*, vol. 21, p. T187–T193, 2008.

- [41] Z. Papadopolos and G. Kasner, “Thick atomic layers of maximum density as bulk terminations of quasicrystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 094206, 2005.
- [42] Z. Papadopolos, “To the model of a decagonal al-cu-co,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 226, no. 1, p. 012003, 2010.
- [43] B. Freedman, G. Bartal, M. Segev, R. Lifshitz, D. N. Christodoulides, and J. W. Fleischer, “Wave and defect dynamics in nonlinear photonic quasicrystals,” *Nature*, vol. 440, no. 7088, pp. 1166–1169, 2006.
- [44] P. Rose, E. Di Gennaro, G. Abbate, and A. Andreone, “Isotropic properties of the photonic band gap in quasicrystals with low-index contrast,” *Physical Review B*, vol. 84, no. 12, p. 125111, 2011.
- [45] A. W. Rodriguez, A. P. McCauley, Y. Avniel, and S. G. Johnson, “Computation and visualization of photonic quasicrystal spectra via bloch’s theorem,” *Physical Review B*, vol. 77, no. 10, p. 104201, 2008.
- [46] C. Roth, G. Schwalbe, R. Knöfler, F. Zavaliche, O. Madel, R. Haberkern, and P. Häussler, “A detailed comparison between the amorphous and the quasicrystalline state of al-cu-fe,” *Journal of non-crystalline solids*, vol. 250, pp. 869–873, 1999.
- [47] S. Poon, “Electronic properties of quasicrystals an experimental review,” *Advances in Physics*, vol. 41, no. 4, pp. 303–363, 1992.
- [48] B. Wennberg, “Free path lengths in quasi crystals,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 147, no. 5, p. 981, 2012.

- [49] R. E. Apfel, “Water superheated to 279.5 c at atmospheric pressure,” *Nature Phys. Science*, vol. 238, p. 63, 1972.
- [50] J. A. Earl, “Cloud-chamber observations of primary cosmic-ray electrons,” *Physical Review Letters*, vol. 6, no. 3, p. 125, 1961.
- [51] P. G. Debenedetti and F. H. Stillinger, “Supercooled liquids and the glass transition,” *Nature*, vol. 410, no. 6825, pp. 259–267, 2001.
- [52] S. Hecker, “Plutonium science challenges future researchers,” *Actinide Research Quarterly*, vol. 2d/3d quarter, pp. 8–9, 2000.
<http://www.lanl.gov/orgs/nmt/nmtdo/AQarchive/00fall/editorial.html>.
- [53] A. Katok and B. Hasselblatt, *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems*. Cambridge University Press, 1997.
- [54] G. G. Naumis, “Monte-carlo rejection as a tool for measuring the energy landscape scaling of simple fluids,” *Phys. Rev. E*, vol. 71, pp. 056132–1–7, 2005.
- [55] J. Lee and K. J. Strandburg, “First-order melting transition of the hard-disk system,” *Phys. Rev. B*, vol. 46, pp. 11190–11193, Nov 1992.
- [56] A. S. Kraemer and N. G. Gerardo, “Use of the cage formation probability for obtaining approximate phase diagrams,” *J. Chem. Phys.*, vol. 128, p. 134516, 2008.
- [57] A. Tsai, J. Guo, E. Abe, H. Takakura, and T. Sato, “Alloys: A stable binary quasicrystal,” *Nature*, vol. 408, no. 6812, pp. 537–538, 2000.
- [58] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids*. Wiley-VCH, 2004.

- [59] P. G. Debenedetti, *Metastable Liquids*. Princeton University Press, 1996.
- [60] A. Huerta, “Transición vítrea,” Master’s thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, 2003.
- [61] H. Weintraub, M. Ashburner, P. Goodfellow, H. Lodish, C. Arntzen, P. Anderson, T. Rice, T. Geballe, A. Means, H. Ranney, *et al.*, “Through the glass lightly,” *Science-AAAS-Weekly Paper Edition*, vol. 267, no. 5204, pp. 1609–1618, 1995.
- [62] D. Levine and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals: a new class of ordered structures,” *Physical review letters*, vol. 53, no. 26, p. 2477, 1984.
- [63] C. Wang and R. A. Barrio, “Theory of the raman response in fibonacci superlattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, pp. 191–194, 1988.
- [64] T. Ishimasa, H.-U. Nissen, and Y. Fukano, “New order state between crystalline and amorphous in Ni-Cr particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 55, pp. 511–515, 1985.
- [65] U. Köster, J. Meinhardt, S. Roos, and H. Liebertz, “Formation of quasicrystals in bulk glass forming Zr-Cu-Ni-Al alloys,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, pp. 179–181, 1996.
- [66] B. Chakraborty, “From quasicrystals to icosahedral glass,” *Phys. Rev. B*, vol. 38, pp. 345–350, 1988.
- [67] Y. Shen, T. Kim, A. Gangopadhyay, and K. Kelton, “Icosahedral order, frustration, and the glass transition: Evidence from time-dependent nucleation and supercooled liquid structure studies,” *Physical review letters*, vol. 102, no. 5, p. 057801, 2009.

- [68] A. Telcs, “Diffusive limits on the penrose tiling,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 141, no. 4, pp. 661–668, 2010.
- [69] W. Sprengel, T. A. Lograsso, and H. Nakajima, “Mn self-diffusion in single grain icosahedral al- $\{70\}$ pd- $\{21.5\}$ mn- $\{8.5\}$ quasicrystals,” *Physical review letters*, vol. 77, no. 26, p. 5233, 1996.
- [70] B. Passaro, C. Sire, and V. G. Benza, “Anomalous diffusion and conductivity in octagonal tiling models,” *Phys. Rev. B*, vol. 46, pp. 13751–13755, Dec 1992.
- [71] M. de Boissieu, “Phonons and phasons in icosahedral quasicrystals,” *Israel Journal of Chemistry*, vol. 51, no. 11-12, pp. 1292–1303, 2011.
- [72] L. Cui-Lian and L. You-Yan, “Phason-strain influence on low-temperature specific heat of the decagonal al-ni-co quasicrystal,” *Chinese Physics Letters*, vol. 18, no. 4, p. 570, 2001.
- [73] E. Abe, S. Pennycook, and A. Tsai, “Direct observation of a local thermal vibration anomaly in a quasicrystal,” *Nature*, vol. 421, no. 6921, pp. 347–350, 2003.
- [74] K. Jiang and P. Zhang, “Numerical methods for quasicrystals,” *J. of Comp. Phys.*, vol. 256, p. 428, 2014.
- [75] V. Heine, *Group Theory and Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1960.
- [76] F. C. Phillips, *An Introduction of Crystallography*. Longmans Canada, 1963.
- [77] M. L. Bellac, F. Mortessagne, and G. G. Batrouni, *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics*. Cambridge, 2004.

- [78] L. García-Colín and P. Goldstein-Menache, *La física de los procesos irreversibles*. El colegio nacional, 2003.
- [79] A. Einstein, “On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat,” *Ann. der Physik*, vol. 17, no. 549-560, p. 16, 1905.
- [80] A. Fick, “Ueber diffusion,” *Ann. der Physik*, vol. 170, pp. 59–86, 1855.
- [81] T. Solomon, E. R. Weeks, and H. L. Swinney, “Observation of anomalous diffusion and lévy flights in a two-dimensional rotating flow,” *Physical Review Letters*, vol. 71, no. 24, p. 3975, 1993.
- [82] E. R. Weeks, J. Urbach, and H. L. Swinney, “Anomalous diffusion in asymmetric random walks with a quasi-geostrophic flow example,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 97, no. 1, pp. 291–310, 1996.
- [83] T. Voigtmann and J. Horbach, “Double transition scenario for anomalous diffusion in glass-forming mixtures,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, p. 205901, 2009.
- [84] H. M. Stark, *An introduction to Number Theory*. Markham Publishing Company, 1970.
- [85] H. A. Lorentz, “The motion of electrons in metallic bodies,” *Proc. Roy. Acad. Amst.*, vol. 7, pp. 438–453, 1905.
- [86] C. Bianca, “On the existence of periodic orbits in nonequilibrium ehrenfest gas,” in *International Mathematical Forum*, vol. 7, pp. 221–232, 2012.

- [87] C. Bianca and L. Rondoni, “The nonequilibrium ehrenfest gas: A chaotic model with flat obstacles?,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 19, no. 1, pp. 013121–013121, 2009.
- [88] N. I. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, and Y. G. Sinai, “Steady-state electrical conduction in the periodic lorentz gas,” *Commun. Math. Phys.*, vol. 154, pp. 569–601, 1993.
- [89] N. Chernov and D. Dolgopyat, “Lorentz gas with thermostatted walls,” in *Annales Henri Poincaré*, vol. 11, pp. 1117–1169, Springer, 2010.
- [90] H. Larralde, F. Leyvraz, and C. Mejia-Monasterio, “Transport properties of a modified lorentz gas,” *Journal of statistical physics*, vol. 113, no. 1-2, pp. 197–231, 2003.
- [91] C. Bruin, “Logarithmic terms in the diffusion coefficient for the lorentz gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 29, p. 1670–1674, 1972.
- [92] D. P. Sanders, “Normal diffusion in crystal structures and higher-dimensional billiard models with gaps,” *Phys. Rev. E*, vol. 78, pp. 060101–1–4, 2008.
- [93] D. Szász and T. Varjú, “Limit laws and recurrence for the planar lorentz process with infinite horizon,” *J. Stat. Phys.*, vol. 129, pp. 59–80, 2007.
- [94] D. I. Dolgopyat and N. I. Chernov, “Anomalous current in periodic lorentz gases with infinite horizon,” *Russian Mathematical Surveys*, vol. 64, no. 4, p. 651, 2009.
- [95] J. Machta and R. Zwanzig, “Diffusion in a periodic lorentz gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, p. 1959–1962, 1983.

- [96] A. Zacherl, T. Geisel, J. Nierwetberg, and G. Radons, “Power spectra for anomalous diffusion in the extended sinai billiard,” *Phys. Lett. A*, vol. 114, pp. 317–321, 1986.
- [97] P. M. Bleher, “Statistical properties of two-dimensional periodic lorentz gas with infinite horizon,” *J. Stat. Phys.*, vol. 66, pp. 315–373, 1992.
- [98] C. P. Dettmann, “New horizons in multidimensional diffusion: The lorentz gas and the riemann hypothesis,” *J. Stat. Phys.*, vol. 146, pp. 181–204, 2012.
- [99] P. Nandori, D. Szasz, and T. Varju, “Tail asymptotics of free path lengths for the periodic lorentz process. on dettmann’s geometric conjectures,” *arXiv preprint arXiv:1210.2231*, 2012.
- [100] L. A. Bunimovich and Y. G. Sinai, “Statistical properties of lorentz gas with periodic configuration of scatterers,” *Commun. Math. Phys.*, vol. 78, pp. 479–497, 1981.
- [101] B. Moran and W. G. Hoover, “Diffusion in a periodic lorentz gas,” *J. Stat. Phys.*, vol. 48, pp. 709–726, 1987.
- [102] D. P. Sanders, “Fine structure of distributions and central limit theorem in diffusive billiards,” *Phys. Rev. E*, vol. 71, pp. 016220–1–16, 2005.
- [103] J. Marklos and A. Strömbergsson, “Power-law distributions for the free path length in lorentz gases,” *arXiv preprint arXiv:1310.0328*, 2013.
- [104] F. Golse, “Recent results on the periodic lorentz gas,” in *Nonlinear Partial Differential Equations*, pp. 39–99, Springer, 2012.

- [105] M. O. Rabin, “Probabilistic algorithm for testing primality,” *Journal of number theory*, vol. 12, no. 1, pp. 128–138, 1980.
- [106] F. Höfling, T. Munk, E. Frey, and T. Franosch, “Critical dynamics of ballistic and brownian particles in a heterogeneous environment,” *The Journal of chemical physics*, vol. 128, p. 164517, 2008.
- [107] F. Höfling, T. Franosch, and E. Frey, “Localization transition of the three-dimensional lorentz model and continuum percolation,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, p. 165901, 2006.
- [108] F. Höfling and T. Franosch, “Crossover in the slow decay of dynamic correlations in the lorentz model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, pp. 140601–4, 2007.
- [109] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Free path lengths in quasicrystals,” *arXiv preprint arXiv:1304.2044*, 2013.
- [110] D. P. Sanders and H. Larralde, “Occurrence of normal and anomalous diffusion in polygonal billiard channels,” *Phys. Rev. E*, vol. 73, p. 026205, 2006.
- [111] L. A. Bunimovich and S. E. Troubetzkoy, “Recurrence properties of lorentz lattice gas cellular automata,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 67, no. 1, pp. 289–302, 1992.
- [112] G. rey Grimmett, “Percolation,” 1989.
- [113] E. Cohen and F. Wang, “New results for diffusion in lorentz lattice gas cellular automata,” *J. Stat. Phys.*, vol. 81, pp. 445–466, 1995.

- [114] R. M. Ziff, X. Kong, and E. Cohen, “Lorentz lattice-gas and kinetic-walk model,” *Physical Review A*, vol. 44, no. 4, p. 2410, 1991.
- [115] M. Harris, “Nontrivial phase transition in a continuum mirror model,” *Journal of Theoretical Probability*, vol. 14, no. 2, pp. 299–317, 2001.
- [116] J. E. S. Socolar and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals. ii. unit-cell configurations,” *Phys. Rev. B*, vol. 34, p. 617, 1986n.
- [117] M. Senechal, *Quasicrystals and Geometry*. Cambridge University Press, 1995.
- [118] G. G. Naumis and J. L. Aragón, “Analytic expressions for the vertex coordinates of quasiperiodic lattices,” *Z. Kristallogr.*, vol. 218, pp. 1–6, 2003.
- [119] P. Steinhardt and S. Ostlund, *The Physics of Quasicrystals*. World Scientific, 1987.
- [120] J. You, J. Yan, J. Zhong, and X. Yan, “A renormalization group approach for the local electronic green’s functions in two-dimensional quasicrystals,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 17, no. 3, p. 231, 1992.
- [121] J. Ashraff and R. Stinchcombe, “Exact decimation approach to the green’s functions of the fibonacci-chain quasicrystal,” *Physical Review B*, vol. 37, no. 10, p. 5723, 1988.
- [122] N. de Bruijn, “Algebraic theory of penrose’s non-periodic tiling of the plane. i,” *Ned. Akad. Wet. Proc. Ser. A*, vol. 43, pp. 39–66, 1981.

- [123] J. E. Socolar, P. J. Steinhardt, and D. Levine, “Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry,” *Physical Review B*, vol. 32, no. 8, pp. 5547–5550, 1985.
- [124] P. Kramer and R. Neri, “On periodic and non-periodic space fillings of em obtained by projection,” *Acta Cryst.*, vol. A40, pp. 580–587, 1984.
- [125] M. Senechal, “What is a quasicrystal?,” *Notices of the AMS*, vol. 53, pp. 886–887, 2006.
- [126] R. Penrose., *La nueva mente del emperador*. Fondo de Cultura Económica, 1996.
- [127] D. Levine and P. Steinhardt, “Quasicrystal i. definition and structure,” *Phys. Rev. B*, vol. 34, pp. 596–616, 1986.
- [128] C. Dellago and H. A. Posch
- [129] T. Franosch, F. Höfling, T. Bauer, and E. F. title = Persistent memory for a Brownian walker in a random array of obstacles journal = Chem. Phys. year = 2010 volume = 375(2) pages = 540-547
- [130] H. van Beijeren, A. Latz, and J. R. Dorfman
- [131] J. Marklof, “Kinetic transport in crystals,” in *Xvith International Congress on Mathematical Physics*, 1997.
- [132] W. Götze, E. Leutheusser, and S. Yip, “Diffusion and localization in the two-dimensional lorentz model,” *Phys. Rev. A*, vol. 25, p. 533, 1982.
- [133] T. Franosch, M. Spanner, T. Bauer, G. E. Schröder-Turk, and F. Höfling, “Space-resolved dynamics of a tracer in a disordered solid,” *J. Non-Cryst Solids*, vol. 357, no. 2, pp. 472 – 478, 2011.

Apéndice A

Artículo publicado

Se adjunta a esta tesis el artículo publicado en Physical Review Letters, el cual resume los principales resultados obtenidos en esta investigación.

Embedding Quasicrystals in a Periodic Cell: Dynamics in Quasiperiodic Structures

Atahualpa S. Kraemer* and David P. Sanders†

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México,
Ciudad Universitaria, México D.F. 04510, Mexico*

(Received 31 May 2012; revised manuscript received 24 March 2013; published 18 September 2013)

We introduce a construction to “periodize” a quasiperiodic lattice of obstacles, i.e., embed it into a unit cell in a higher-dimensional space, reversing the projection method used to form quasilattices. This gives an algorithm for simulating dynamics, as well as a natural notion of uniform distribution, in quasiperiodic structures. It also shows the generic existence of *channels*, where particles travel without colliding, up to a critical obstacle radius, which we calculate for a Penrose tiling. As an application, we find superdiffusion in the presence of channels, and a subdiffusive regime when obstacles overlap.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.125501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.125501)

PACS numbers: 61.44.Br, 05.45.Pq, 05.60.Cd, 66.30.je

Quasicrystals are produced by cooling from a melt at a rate intermediate between that of periodic crystals (slow) and glasses (fast), and have a degree of order which is intermediate between the two, being neither periodic nor random [1–4]. Such structures have been found and applied in many different contexts, including liquid crystals [5], bilayer water [6], asteroids [7,8], magnetic systems [9], and photonics [10].

Transport properties of quasicrystalline materials are of particular interest for their production and for technological applications [11]. Diffusion has been extensively studied experimentally [12–14]; it is related to other transport properties, such as heat conductivity and electronic transport [12]. The measured thermopower in quasicrystals is due to electron diffusion [15], and diffusion plays a role in the formation of the equilibrium phase during high-temperature annealing [16].

Since quasicrystals are often perfect quasilattices [17], it is useful to study simple models in order to understand the effect of geometry on transport properties. A widely used billiard model for transport properties is the Lorentz gas (LG) [18], consisting of an array of fixed obstacles in \mathbb{R}^n , with freely moving particles undergoing elastic collisions with the obstacles.

The geometry in which the obstacles are arranged in a LG strongly influences its dynamical properties. LGs with a periodic geometry usually exhibit normal diffusion, i.e., asymptotic behavior $\langle \Delta x(t)^2 \rangle \sim t$ as $t \rightarrow \infty$ for the mean-squared displacement [19–23]; here, $\Delta x(t) := x(t) - x(0)$ is the displacement of a particle at time t , and $\langle \cdot \rangle$ denotes an average over uniform initial conditions. However, a key role is played by the presence of channels, i.e., empty regions through which particles may travel infinitely far without colliding: channels of the highest dimension, $n - 1$, give rise to weak superdiffusion of the form $\langle \Delta x(t)^2 \rangle \sim t \ln t$, with a logarithmic correction [23–27].

If the obstacles are placed randomly, but without overlap, normal diffusion is found [28]. When overlaps are allowed, there is a crossover from a subdiffusive regime,

$\langle \Delta x(t)^2 \rangle \sim t^\alpha$ with $\alpha < 1$, to normal diffusion at long times; the slowdown of diffusion is due to the presence of large traps near the percolation threshold [29–33].

It is then natural to investigate dynamics, and in particular diffusive transport, for the intermediate case, a quasiperiodic LG, as suggested in Ref. [34] for a Penrose tiling. A random walk on this structure exhibits normal diffusion [35], suggesting that the same should occur in the billiard model [34]. We are not aware of previous numerical results in this direction, except in a nonphysical one-dimensional (1D) system [36], mainly due to the challenge of simulating quasiperiodic systems in the absence of periodic boundary conditions. Recently, the distribution of free paths in quasicrystals has been established in the so-called Boltzmann-Grad limit [37].

In this Letter, we introduce a construction to embed quasiperiodic structures into a periodic system of higher dimension, by reversing the projection method used to produce quasiperiodic lattices [38–40]. Our construction solves the principal difficulty with quasiperiodic systems, by reducing the system to a single periodic unit cell, and hence to a finite (compact) set, now in the higher-dimensional system; see also Ref. [37].

This has several implications. First, it provides a direct method for understanding and numerically simulating dynamics in quasiperiodic structures. Second, it gives a natural notion of uniform distribution (measure), and hence of averages, in quasiperiodic systems.

Motivated by the results cited above on periodic Lorentz gases, as well as by Ref. [34], where it was suggested that the absence of periodicity may prevent the occurrence of channels, and by Refs. [41,42], where it was shown experimentally and analytically that interplane and interline distances in certain perfect quasilattices are finite, we may ask when a quasiperiodic LG may contain channels. A third consequence of our construction is that in fact this occurs generically: when the obstacles of a quasiperiodic LG are sufficiently small, it does contain channels.

As an example, we apply our method to study diffusive properties of a particular 2D quasiperiodic LG, finding three regimes, including superdiffusion in the presence of channels, a subdiffusive regime when the obstacles overlap, and normal diffusion for intermediate geometries. We also find explicitly the critical obstacle radius at which channels are blocked in the quasiperiodic Penrose tiling.

Projection method.—The projection method [38,39,43] constructs a quasiperiodic lattice in a subspace E (including the origin) of a Euclidean space \mathbb{R}^n by projecting vertices of a hypercubic lattice L , consisting of points with integer coordinates in \mathbb{R}^n , onto E [38–40]. We denote by m the dimension of E , with $m < n$, and by E_\perp the orthogonal complement of E , of dimension $n - m$, such that $E \oplus E_\perp = \mathbb{R}^n$. In the following, we refer to orthogonal projections as “projections.”

One version of the projection method [39] considers the Voronoi region of a lattice point p of L , i.e., a cube centered at p , projecting onto E exactly those p whose Voronoi regions intersect E ; see Fig. 1(a). This gives a set L_\parallel of points in E , which is a quasiperiodic lattice if E is *totally irrational* [39].

The Voronoi projection method produces the same quasilattice as the following canonical projection method [39]: consider a cube whose side length is the lattice spacing, centred at the origin, and project it onto the orthogonal subspace E_\perp , giving a set W . The lattice points in L which lie inside $W \times E$ are projected onto E ; see Fig. 1(b).

Construction of embedding.—The quasiperiodic LG consists of balls of dimension m in E centred at each point of L_\parallel . We “reverse” the projection method to construct a billiard obstacle K inside a unit cube C of \mathbb{R}^n with periodic boundary conditions, designed such that trajectories of the billiard dynamics in C with velocities *parallel* to E give trajectories of the quasiperiodic LG when the dynamics is “unfolded” to \mathbb{R}^n , by using periodic boundary conditions in one cell, but keeping track of which cell has been reached [44].

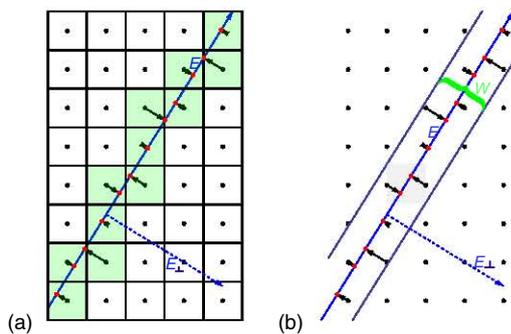


FIG. 1 (color online). Two versions of the projection method: (a) Voronoi regions, shown as shaded (green) boxes; arrows show lattice points in L that are projected onto the line E . (b) Canonical version, projecting lattice points inside a strip.

Consider free motion of a particle inside C whose velocity is constrained to move parallel to E . When the particle reaches a face of C , it jumps to the opposite face, due to the periodic boundary conditions, but maintains the same velocity. It then moves on a different “slice”, $E_\nu := E + \mathbf{v}$, parallel to E but translated by a vector $\mathbf{v} \in E_\perp$; see Fig. 2(a). In this way, the whole of the plane E is “wrapped” into one single unit cell C .

Since E is totally irrational, a trajectory emanating from a generic initial condition inside the cube C will fill C densely [45]; similarly, the collection of parallel slices E_ν which are visited by a given trajectory also fill C densely [45].

C can now be thought of as representing *each* Voronoi cell in \mathbb{R}^n which intersects E . The projection method then requires to project the origin onto each slice E_ν intersecting C . We denote by W the set of such points; it is exactly the projected set used in the canonical projection method. W is a subset of full dimension inside E_\perp , which can be constructed by projecting the vertices of C onto E_\perp and taking the convex hull.

We now project onto E_\perp not just a single point at the origin, but the whole billiard obstacle B in E , an m -dimensional ball of radius r centered at the origin. The result is a new set $P := W \times B$ of full dimension n . However, some parts of P fall outside C , as shown in Fig. 2(a). We must thus *periodize* P via the periodic boundary conditions, giving a set K , which is the final result of the construction, a billiard obstacle inside C .

To simulate the quasiperiodic billiard in the m -dimensional space E , we run billiard dynamics inside the n -dimensional cube C , imposing elastic collisions with the billiard obstacle K . The particles have initial velocities parallel to E ; since the boundary of K is cylindrical, with axis perpendicular to E , collisions of the particles with K do not (in principle) affect this property, so that they remain parallel to E during the dynamics. (In practice, in

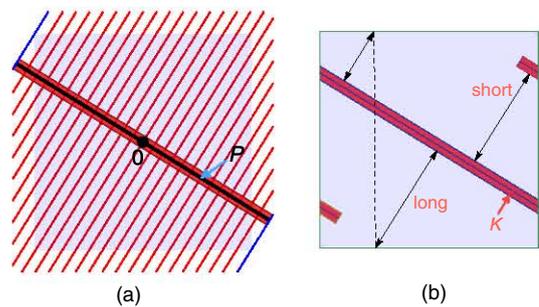


FIG. 2 (color online). Embedding a 1D quasiperiodic lattice into a 2D periodic billiard. (a) Construction of the set P by projection and “thickening.” Parallel diagonal lines (red online) show “slices” E_ν . (b) The billiard obstacle K , after periodizing P , made of three oblique (red) bars. Short and long paths for the billiard dynamics are shown.

a numerical simulation, it is desirable to project the velocities onto E at intervals.) When the resulting billiard trajectory is unfolded to \mathbb{R}^n , it gives exactly a billiard trajectory in the quasiperiodic LG.

Uniform distribution.—Our construction provides a natural way to define a uniform distribution (measure) on the phase space of a quasiperiodic system: particle positions are uniform in the cube C outside the billiard obstacle K , and velocities have unit speed and uniform directions parallel to E . Averages are then taken with respect to this uniform distribution. We conjecture that the dynamics in a quasiperiodic LG is ergodic; i.e., from almost any (accessible) starting point, the trajectory fills uniformly the accessible phase space.

The simplest example is a 1D quasiperiodic billiard with $n = 2$ and $m = 1$, so that C is a square, E is a straight line with irrational slope α , and B is a line segment of length r . The set K then consists of three thickened line segments with slope $-1/\alpha$; see Fig. 2(b). Since K divides the square completely into two parts, there is, as expected, no diffusion in this case: any given trajectory remains confined, bouncing between two neighboring obstacles. However, our construction easily allows us to calculate, for example, the probabilities of long and short paths from uniform initial conditions, in terms of the sizes of the respective areas [see Fig. 2(b)].

2D quasiperiodic Lorentz gas.—A nontrivial example in which the construction may be visualized is a 2D quasiperiodic LG formed by projecting a 3D simple cubic lattice, with cubic unit cell C , onto a totally irrational 2D plane E , with B being a disc of radius r and W a 1D line perpendicular to E ; the resulting 3D periodic billiard is shown in Fig. 3. The obstacle K consists of three segments

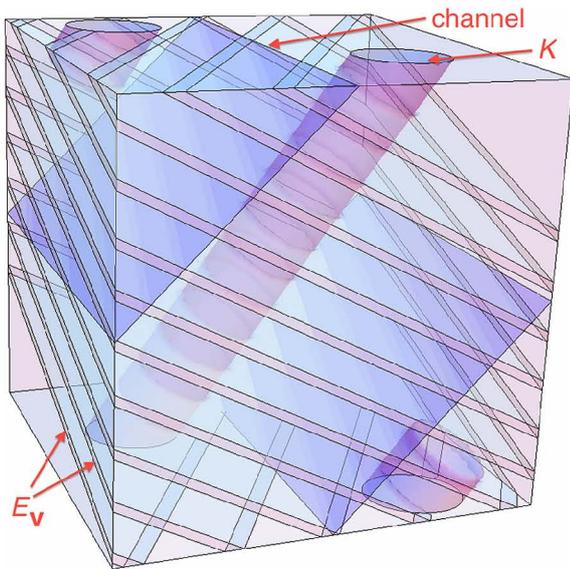


FIG. 3 (color online). 2D quasiperiodic LG embedded in a 3D cube, with notation as in the text.

of a cylinder, and the two parts of the cylinder which arise by periodizing P are capped by planes E_v passing through vertices of C .

Channels.—This 2D LG (Fig. 3) provides an example in which the occurrence of channels in quasiperiodic LGs may be visualised, thus providing intuition for the general case, as follows.

The axis W of the cylinder K intersects two of the cube's faces. Suppose that the radius r of the obstacle B , and hence of the cylinder K , is small enough that there is (at least) one face of the cube which is not intersected by any of the three cylindrical pieces of K . Then in the 3D billiard with arbitrary velocities (not restricted to be parallel to E) there is a planar channel Π [23] lying along any such face.

Now restricting particle velocities to be parallel to E , we see that each planar channel Π in the 3D periodic billiard induces a rectangular channel in the 2D quasiperiodic LG, given by the intersection of E with Π . As in the periodic LG [24,25], additional channels may appear as the radius decreases; for example, Fig. 3 shows an additional planar channel at an angle $\pi/4$.

This generalizes to quasiperiodic LGs in $m > 2$ dimensions with $(m - 1)$ -dimensional principal horizons [46]. Thus our construction shows the generic occurrence of channels in quasiperiodic Lorentz gases when the obstacles have sufficiently small radius.

As r increases, the channels are blocked one by one, as the billiard obstacles expand sufficiently to intersect the planes defining the channels. When the billiard obstacles are large enough to cross the faces of the cube, their periodic images must also be taken into account as additional obstacles in the simulations; for this reason, the algorithm is most efficient when the obstacles are small, which is the most difficult case to treat using standard methods.

Diffusive properties.—Our construction immediately gives a direct simulation method for quasiperiodic billiard dynamics. As an example, we numerically study diffusive properties of the 2D quasiperiodic LG projected from three dimensions: We place 10^6 (noninteracting) particles with uniform positions in the 3D unit cube C , and unit-speed velocities with uniform directions parallel to the plane E with unit normal vector $[1/(\phi + 2), \phi/(\phi + 2), \phi/(\sqrt{\phi + 2})]$, where $\phi := (1 + \sqrt{5})/2$.

Figure 4 plots $\langle \Delta x(t)^2 \rangle / t$, to emphasize deviations from normal diffusion [47], for different radii r of the billiard obstacles. We see that for small radii, this quantity increases logarithmically in time, indicating (weak) superdiffusion $\langle \Delta x(t)^2 \rangle \sim t \ln t$, as in the periodic case, corresponding to the presence of channels in the quasiperiodic LG.

However, the convergence to this limiting regime is very slow. We interpret this as being due to regions adjacent to the infinite channels in which free paths are unbounded, but not infinite (“locally finite”); this phenomenon does not occur in periodic models. For short times, the effective

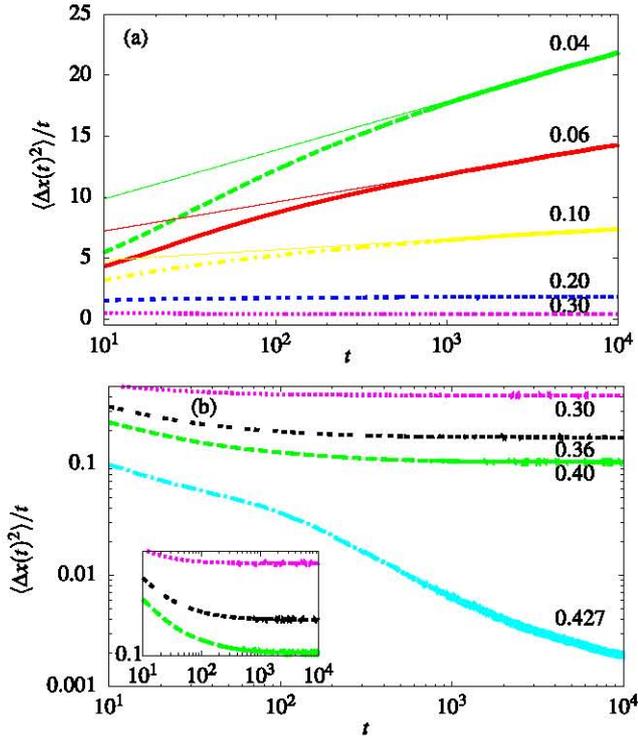


FIG. 4 (color online). $\langle \Delta x(t)^2 \rangle / t$ as a function of t for different radii r (labelled), for the quasiperiodic LG in two dimensions projected from three dimensions. (a) Semilogarithmic scale. The thin solid lines show fits of the form $\langle x(t)^2 \rangle = C(r)t \ln t + D(r)t$. (b) Logarithmic scale; the inset emphasizes curvature.

width of the channel is thus larger, giving a decreasing effective superdiffusion coefficient as time increases, and hence the curvature visible in Fig. 4. These regions are always associated with channels, except exactly at the critical radius $r = r_c$, when all channels are blocked, but free paths are still unbounded, as we will discuss elsewhere; we find normal diffusion in this case [46].

As the obstacle radius, r , increases, the geometry of the quasiperiodic LG, and hence the diffusive behavior, undergoes qualitative changes. At $r \approx 0.26$, the obstacles begin to overlap [46]. In this model, this overlap occurs *before* the last planar channel is blocked, so that we expect superdiffusion; however, we are unable to detect this numerically, and the diffusion appears normal already for $r = 0.20$ (with a channel, but not overlapping). In the Penrose LG, on the contrary, all channels are blocked before any obstacles overlap.

At the critical radius $r_c \approx 0.3$, all channels are blocked. For $r > r_c$, we observe an initial subdiffusive regime, with a crossover to normal diffusion at long times, as in the random LG; see Fig. 4(b). Finally, there is a radius $r \approx 0.428$ at which particles become confined in bounded regions. Note that these values of r can be calculated analytically, but the results are complicated functions of the geometrical parameters.

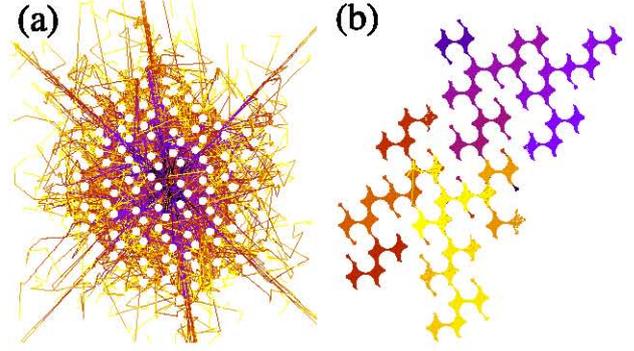


FIG. 5 (color online). Representative trajectories of 2D quasiperiodic LG projected from three dimensions. The gray (color) scale indicates time. Blank, circular regions correspond to the billiard obstacles, whose positions are identical in the two subfigures. (a) $r = 0.18$; several initial conditions. (b) $r = 0.425$; single initial condition.

Figure 5(a) shows representative trajectories for $r = 0.18$, highlighting the channels within the quasiperiodic LG. There are channels in three directions, corresponding to those in Fig. 3—two along two perpendicular, vertical faces of the cube, and one at an angle of $\pi/4$. Figure 5(b) shows a single trajectory for large r , close to the percolation threshold at which diffusion ceases. Narrow bottlenecks between cavities of different sizes are visible, which we interpret as the origin of the observed slow diffusive behavior.

Penrose Lorentz gas.—Our construction may also be carried out for more realistic models, such as a Penrose LG, formed by placing discs at each vertex of a Penrose tiling [34]. This structure is obtained by projecting a 5D lattice onto a 2D subspace E [38,39], so that P is a 5D cylinder, the product of a 3D polytope W [38] with a 2D ball.

Our results show that the Penrose LG must have channels for obstacle radius r less than a critical value r_c . To calculate r_c , we must find when at least one 4D (hyper-) face of the 5D hypercube C is not touched by K . Thus, for each face of C , we find the minimum distance (in the direction of E) to all vertices p_i of W . The maximum over all faces then seems to be enough to calculate r_c , or at least a lower bound [46]. For the Penrose tiling, the symmetry implies that many of these distances are equal, and we obtain $r_c = L/(2\tau^2)$, where $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ and L is the side length of the rhombi forming the tiling, which we have confirmed numerically [46].

In summary, we have introduced a construction to embed quasiperiodic lattices into a unit cell in a higher-dimensional space, which shows that quasiperiodic Lorentz gases generically have channels for small obstacle radii, and which provides a direct simulation method for dynamics in quasiperiodic structures. These systems exhibit a range of diffusive properties, including super- and

subdiffusion, depending on the geometry. We expect that our construction can be profitably applied to further phenomena in quasiperiodic systems.

The authors thank C. Dettmann, H. Spohn, and D. Szász for discussions. Financial support is acknowledged from CONACYT for ASK's doctoral studentship, and from the SEP-CONACYT Grant No. CB-101246.

Note added in proof.—During revision of the proofs, the authors found previous results which are apparently related, e.g., [48]. However, in those references, *starting* from *any* higher-dimensional periodic system, a quasilattice of points is obtained by a cut procedure, and structural properties are studied; whereas we *construct specific* higher-dimensional billiard models in order to study *dynamics*.

*ata.kraemer@gmail.com

†dpsanders@ciencias.unam.mx

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [2] J. Holzer and K. F. Kelton, in *Quasicrystals and Incommensurate Structures in Condensed Matter: Third International Meeting*, edited by M. J. Yacaman and M. Torres (North Holland, Amsterdam, 1993), p. 103.
- [3] A. Haji-Akbari, M. Engel, A. S. Keys, X. Zheng, R. G. Petschek, P. Palfy-Muhoray, and S. C. Glotzer, *Nature (London)* **462**, 773 (2009).
- [4] B. Chakraborty, *Phys. Rev. B* **38**, 345 (1988).
- [5] X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu, V. Percec, A. E. Dulcey, and J. K. Hobbs, *Nature (London)* **428**, 157 (2004).
- [6] J. C. Johnston, N. Kastelowitz, and V. Molinero, *J. Chem. Phys.* **133**, 154516 (2010).
- [7] L. Bindi, P. J. Steinhardt, N. Yao, and P. J. Lu, *Science* **324**, 1306 (2009).
- [8] L. Bindi, J. M. Eiler, Y. Guan, L. S. Hollister, G. MacPherson, P. J. Steinhardt, and N. Yao, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **109**, 1396 (2012).
- [9] K. Deguchi, S. Matsukawa, N. K. Sato, T. Hattori, K. Ishida, H. Takakura, and T. Ishimasa, *Nat. Mater.* **11**, 1013 (2012).
- [10] S. M. Thon, W. T. M. Irvine, D. Kleckner, and D. Bouwmeester, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 243901 (2010).
- [11] F. Samavat, M. Gladys, C. Jenks, T. Lograsso, B. King, and D. O'Connor, *Surf. Sci.* **601**, 5678 (2007).
- [12] L. Guidoni, B. Dépret, A. di Stefano, and P. Verkerk, *Phys. Rev. A* **60**, R4233 (1999).
- [13] T. Zumkley, H. Mehrer, K. Freitag, M. Wollgarten, N. Tamura, and K. Urban, *Phys. Rev. B* **54**, R6815 (1996).
- [14] H. Mehrer and R. Galler, *J. Alloys Compd.* **342**, 296 (2002).
- [15] K. Giannò, A. Sologubenko, M. Chernikov, H. Ott, I. Fisher, and P. Canfield, *Mater. Sci. Eng., A* **294–296**, 715 (2000).
- [16] S. Hocker, F. Gähler, and P. Brommer, *Philos. Mag.* **86**, 1051 (2006).
- [17] Z. Papadopoulos, *J. Phys. Conf. Ser.* **226**, 012003 (2010).
- [18] H. A. Lorentz, *Proc. R. Acad. Amst.* **7**, 438 (1905).
- [19] C. Bruin, *Phys. Rev. Lett.* **29**, 1670 (1972).
- [20] B. Moran and W. G. Hoover, *J. Stat. Phys.* **48**, 709 (1987).
- [21] L. A. Bunimovich and Y. G. Sinai, *Commun. Math. Phys.* **78**, 479 (1981).
- [22] N. I. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, and Y. G. Sinai, *Commun. Math. Phys.* **154**, 569 (1993).
- [23] D. P. Sanders, *Phys. Rev. E* **78**, 060101 (2008).
- [24] P. M. Bleher, *J. Stat. Phys.* **66**, 315 (1992).
- [25] D. Szász and T. Varjú, *J. Stat. Phys.* **129**, 59 (2007).
- [26] C. P. Dettmann, *J. Stat. Phys.* **146**, 181 (2012).
- [27] D. I. Dolgopyat and N. I. Chernov, *Russ. Math. Surv.* **64**, 651 (2009).
- [28] A. B. Adib, *Phys. Rev. E* **77**, 021118 (2008).
- [29] J. Machta and S. M. Moore, *Phys. Rev. A* **32**, 3164 (1985).
- [30] T. Franosch, M. Spanner, T. Bauer, G. E. Schröder-Turk, and F. Höfling, *J. Non-Cryst. Solids* **357**, 472 (2011).
- [31] F. Höfling, T. Franosch, and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 165901 (2006).
- [32] W. Götze, E. Leutheusser, and S. Yip, *Phys. Rev. A* **23**, 2634 (1981).
- [33] W. Götze, E. Leutheusser, and S. Yip, *Phys. Rev. A* **25**, 533 (1982).
- [34] D. Szász, *Nonlinearity* **21**, T187 (2008).
- [35] A. Telcs, *J. Stat. Phys.* **141**, 661 (2010).
- [36] B. Wennberg, *J. Stat. Phys.* **147**, 981 (2012).
- [37] J. Marklof and A. Strömbergsson, [arXiv:1304.2044](https://arxiv.org/abs/1304.2044).
- [38] N. de Bruijn, *Ned. Akad. Wet. Proc. Ser. A* **43**, 39 (1981).
- [39] M. Senechal, *Quasicrystals and Geometry* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995).
- [40] P. Kramer and R. Neri, *Acta Crystallogr. Sect. A* **40**, 580 (1984).
- [41] Z. Papadopoulos, P. Pleasants, G. Kasner, V. Fournée, C. J. Jenks, J. Ledieu, and R. McGrath, *Phys. Rev. B* **69**, 224201 (2004).
- [42] Z. Papadopoulos and G. Kasner, *Phys. Rev. B* **72**, 094206 (2005).
- [43] J. L. Aragón, D. Romeu, L. Beltrán, and A. Gómez, *Acta Crystallogr. Sect. A* **53**, 772 (1997).
- [44] N. Chernov and R. Markarian, *Chaotic Billiards* (American Mathematical Society, Providence, RI, 2006).
- [45] A. Katok and B. Hasselblatt, *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1997).
- [46] A. S. Kraemer and D. P. Sanders (to be published).
- [47] D. P. Sanders and H. Larralde *Phys. Rev. E* **73**, 026205 (2006).
- [48] C. Janot, *Quasicrystals: A Primer* (Oxford University Press, Oxford, UK, 1994), 2nd ed., and references therein.