



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

FACULTAD DE CIENCIAS

FÍSICA ESTADÍSTICA Y SISTEMAS COMPLEJOS

ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y FENÓMENOS DE TRANSPORTE EN SISTEMAS
CUASIPERIÓDICOS DE ALTAS SIMETRÍAS

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

PRESENTA:
ALAN RODRIGO MENDOZA SOSA

TUTOR PRINCIPAL
DR. RICARDO ATAHUALPA SOLÓRZANO KRAEMER
FACULTAD DE CIENCIAS, UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
DRA. KAREN PATRICIA VOLKE SEPÚLVEDA
INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM

DR. LUIS BENET FERNÁNDEZ
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX. FEBRERO DE 2025



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.



**PROTESTA UNIVERSITARIA DE INTEGRIDAD Y
HONESTIDAD ACADÉMICA Y PROFESIONAL
(Graduación con trabajo escrito)**

De conformidad con lo dispuesto en los artículos 87, fracción V, del Estatuto General, 68, primer párrafo, del Reglamento General de Estudios Universitarios y 26, fracción I, y 35 del Reglamento General de Exámenes, me comprometo en todo tiempo a honrar a la Institución y a cumplir con los principios establecidos en el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, especialmente con los de integridad y honestidad académica.

De acuerdo con lo anterior, manifiesto que el trabajo escrito titulado:

Análisis estructural y fenómenos de transporte en sistemas cuasiperiódicos de altas simetrías

que presenté para obtener el grado de ----Doctorado---- es original, de mi autoría y lo realicé con el rigor metodológico exigido por mi programa de posgrado, citando las fuentes de ideas, textos, imágenes, gráficos u otro tipo de obras empleadas para su desarrollo.

En consecuencia, acepto que la falta de cumplimiento de las disposiciones reglamentarias y normativas de la Universidad, en particular las ya referidas en el Código de Ética, llevará a la nulidad de los actos de carácter académico administrativo del proceso de graduación.

Atentamente

Alan Rodrigo Mendoza Sosa - 414003576

Alan Rodrigo

(Nombre, firma y Número de cuenta de la persona alumna)



COORDINACIÓN GENERAL DE ESTUDIOS DE POSGRADO

CARTA AVAL PARA DAR INICIO A LOS TRÁMITES DE GRADUACIÓN

Universidad Nacional Autónoma de México
Secretaría General
Coordinación General de Estudios de Posgrado

Dr. Alberto Güijosa Hidalgo
Programa de Posgrado en Ciencias Físicas
Presente

Quien suscribe, Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer, tutor(a) principal de Alan Rodrigo Mendoza Sosa, con número de cuenta 414003576, integrante del alumnado de Doctorado en Ciencias (Física) de ese programa, manifiesto bajo protesta de decir verdad que conozco el trabajo escrito de graduación elaborado por dicha persona, cuyo título es:

Análisis estructural y fenómenos de transporte en sistemas
cuasiperiódicos de altas simetrías

, así como el reporte que contiene el resultado emitido por la herramienta tecnológica de identificación de coincidencias y similitudes con la que se analizó ese trabajo, para la prevención de faltas de integridad académica.

De esta manera, con fundamento en lo previsto por los artículos 96, fracción III del Estatuto General de la UNAM; 21, primero y segundo párrafos, 32, 33 y 34 del Reglamento General de Exámenes y; 22, 49, primer párrafo y 52, fracción II del Reglamento General de Estudios de Posgrado, **AVALO** que el trabajo de graduación presentado se envíe al jurado para su revisión y emisión de votos, por considerar que cumple con las exigencias de rigurosidad académica previstas en la legislación universitaria.

Protesto lo necesario,

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., a 22 de octubre de 2024
Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer

Tutor(a) principal

*“Y no temas a las piedras del camino, amigo mío,
pues las piedras del camino son el camino en sí.”*

Rafael Lechowski

“Si quieres cambiar algo, cambia tú”

Javier Ibarra Ramos

Agradecimientos

A mis papás, Rosa Martha Sosa Guzmán y Salvador Mendoza Gómez, por su infinito apoyo y amor a lo largo de estos 29 años de vida, siempre impulsando cada una de mis ideas y sueños, no importando que tan lejos de casa me llevaran los mismos. Por cultivar, sin reparo alguno, mi curiosidad y motivación por descubrir algo nuevo, ya sea en la lectura, en la ciencia o en la tecnología. Sin ellos, ni siquiera el primer paso en este camino habría sido posible.

A mi hermana, Martha Anahí Mendoza Sosa, por haber sido un modelo a seguir durante mis primeros años de vida, por haberme motivado, de manera directa e indirecta, a superarme y ser mejor cada día. Por las risas, los juegos, los enojos y los abrazos a lo largo de toda una vida.

A Arturo Tapia Sánchez y Adriana Sofía Herrera Cano, por haberme brindado la más sincera y honesta de las amistades que un ser humano puede recibir. No me da el tamaño de la presente hoja para agradecerles todo lo que me han aportado, desde las mejores tardes de fin de semana platicando de cualquier tema, sazoadas con una deliciosa comida, hasta las noches más épicas jugando juegos de mesa y filosofando sobre la vida. Gracias por haberme escuchado y brindado su consejo en incontables horas de dilemas personales, por siempre regalarme su completa atención y paciencia, aún y cuando el tema de conversación de mi parte fuera el mismo una y otra vez (ustedes saben de qué tema les hablo); por apoyarme, motivarme y brindarme unas oportunidades invaluables para desarrollarme profesionalmente y, sobre todo, por haberme recibido siempre con los brazos abiertos y una sonrisa en su hogar, haciéndome sentir parte de su familia.

A Sandra Citlalli Soto Santos, por su confianza y apoyo incondicional en mí para terminar esta tesis, sobre todo en la recta final de la misma donde mi estado de agotamiento mental me imploraba abandonar todo el proyecto. Gracias por todas esas horas conmigo en la Biblioteca Central, por tu amor infinito e incondicional hacia mí, por enseñarme nuevas formas de decirnos “te quiero”, por recorrer conmigo las calles de la ciudad, por las citas cerca y lejos de la Universidad y por siempre mirarme con toda esa admiración y respeto que nos tenemos el uno al otro. Meine geliebte Frau. Wǒ de yuèliàng hé wǒ de xīngxīng.

A Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer, por todo su apoyo, acompañamiento

y consejos a lo largo de más de 6 años como mi tutor académico y amigo. Gracias por haber creído y confiado en mí para llevar a cabo nuestros múltiples proyectos de investigación, siendo este trabajo la más reciente de nuestras publicaciones, mismas que esperamos sigan en aumento en los años venideros.

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM con clave PAPIIT IN113923 bajo el título “Simulaciones en ambientes desordenados y cuasiperiódicos de simetría alta”. Agradezco de igual forma al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCyT) por la beca otorgada durante el periodo Junio/2021 a Febrero/2025 bajo el número de currículum vitae único 933686.

Resumen

La presente tesis corresponde a la investigación realizada en torno a las propiedades y características de los sistemas cuasiperiódicos de alta simetría rotacional en lo referente a su estructura y los fenómenos de transporte que en ellos ocurren, esto con el objetivo de esclarecer la relación existente entre estos sistemas con los sistemas desordenados. Para dicho propósito hemos realizado simulaciones sobre las trayectorias que describe una partícula neutra dentro de diferentes gases de Lorentz cuasiperiódicos en el límite de Boltzmann-Grad con el objetivo de calcular la distribución de la longitud de vuelos libres como función de la simetría rotacional del sistema cuasiperiódico subyacente; de igual forma hemos estudiado analítica y computacionalmente la distribución de la distancia al vecino más cercano y la distribución del área de las celdas de Voronoi de los sitios que conforman a las retículas cuasiperiódicas como función de su simetría rotacional. Por último, hemos estudiado la hiperuniformidad presente en estos sistemas, considerando diferentes decoraciones para las teselas de los teselados cuasiperiódicos. Los resultados obtenidos muestran que los sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional alta se comportan localmente como sistemas desordenados hasta una cierta escala de longitud, misma que aumenta conforme la simetría rotacional del sistema crece, obteniendo una expresión matemática que nos permite calcular dicha escala.

Abstract

This thesis corresponds to the research conducted on the properties and characteristics of quasiperiodic systems with high rotational symmetry, focusing on their structure and the transport phenomena occurring within them. The aim is to clarify the relationship between these systems and disordered systems. To this end, we performed simulations of the trajectories described by a neutral particle within different quasiperiodic Lorentz gases in the Boltzmann-Grad limit, with the objective of calculating the free flight length distribution as a function of the rotational symmetry of the underlying quasiperiodic system. Similarly, we analytically and computationally studied the distribution of the nearest-neighbor distances and the Voronoi cell area distribution of the sites that form the quasiperiodic lattices as a function of their rotational symmetry. Finally, we examined the hyperuniformity present in these systems, considering different decorations for the tiles of the quasiperiodic tilings. The results obtained show that quasiperiodic systems with high rotational symmetry behave locally as disordered systems up to a certain length scale, which increases as the rotational symmetry of the system grows, and we derived a mathematical expression that allows us to calculate this scale.

Índice general

Agradecimientos	V
Resumen	VII
Abstract	IX
1. Introducción	1
2. Cristalografía clásica	5
2.1. Sobre mosaicos y teselas	5
2.1.1. Breve introducción a las isometrías del plano	6
2.1.2. Las 17 formas de teselar el plano	13
2.2. Sobre cristales y mosaicos	14
2.2.1. Radiografía a un cristal	16
2.2.2. Breve repaso de estado sólido	18
2.2.3. La consolidación de la cristalografía clásica	27
3. Cuasicristales	29
3.1. Descubriendo un material imposible	29
3.2. Modelando un nuevo estado de la materia	31
3.2.1. Teselados aperiódicos	32
3.3. Orden, periodicidad y cuasiperiodicidad	34
3.4. Métodos de construcción	36
3.4.1. Método de corte y proyección	37
3.5. Estado del arte	38
3.5.1. Cuasicristales suaves	39
3.5.2. Cuasicristales fotónicos	40
3.5.3. Gases de Lorentz	41
4. Metodología y detalles del algoritmo	43
4.1. Método dual generalizado	44
4.2. Coordenadas de los vértices del teselado	45
4.3. Descentralizando el método dual generalizado	47
4.4. Vecindad principal y teselas aisladas	52

5. Resultados	55
5.1. Difusión en gases de Lorentz cuasiperiódicos	55
5.1.1. Horizonte localmente finito	57
5.1.2. Límite de Boltzmann-Grad	59
5.2. Análisis estructural local en cuasicristales	64
5.2.1. Distribución de la distancia al vecino más cercano	65
5.2.2. Distribución del área de Voronoi	75
5.3. Análisis estructural global en cuasicristales	78
5.3.1. Hiperuniformidad	78
6. Conclusiones	89
6.1. Trabajo a futuro	90
6.2. Artículos publicados y participación en congresos	91
Apéndice A. Teoremas sobre isometrías del plano	93
Bibliografía	103

1 Introducción

Como su nombre sugiere, el estado sólido es la rama de la física que se encarga de estudiar la estructura y las propiedades de los sistemas que se han identificado como sólidos (es decir, aquellos sistemas que presentan una estructura rígida, capaz de mantener su forma sin necesidad de un contenedor), siendo los cristales su principal objeto de estudio. Por muchas décadas, el concepto y definición de un cristal se consideró tema cerrado, algo tan claro y sencillo que era punto de partida de los diferentes libros de texto, los cuales dictaban como ley universal el hecho de que todo sólido cristalino estaba conformado por un arreglo periódico de átomos. Esta condición tan simple (el poseer una simetría traslacional) imponía una restricción en la simetría rotacional que podían presentar los cristales, dando un total de 230 grupos espaciales para el caso en tres dimensiones si se considera, además de la simetría rotacional, las reflexiones [1].

Con la llegada de los rayos X a finales del siglo XIX, estas hipótesis fueron puestas a prueba de manera experimental analizando el patrón de difracción que se obtiene al hacer incidir un haz de rayos X a través de un sólido, colocando por detrás de este una placa fotográfica. Para el caso de los cristales, el patrón obtenido consistía en un conjunto de puntos discretos y perfectamente bien definidos, siendo estos consistentes con alguna de las proyecciones que se esperaba encontrar si la estructura atómica del sistema analizado fuera alguna de las 230 estructuras atómicas válidas (en el caso particular de los policristales, su patrón de difracción no cae dentro de estas 230 estructuras, pues el conjunto y la distribución espacial de los puntos que lo conforman está determinado por la orientación espacial de los diferentes granos que constituyen al policristal, así como la separación entre las superficies de estos); sin embargo, la gran mayoría de las muestras analizadas por este método arrojaban un patrón de difracción más bien difuso y/o compuesto por regiones claras y regiones oscuras, siendo estas explicadas por una estructura atómica aparentemente desordenada, similar a lo que uno esperaba encontrar al analizar la estructura de un líquido. A los sólidos cuyo patrón de difracción corresponde a alguno de estos últimos casos se les denominó “sólidos amorfos”. En el capítulo 2 se brinda una imagen histórica más detallada, así como algunos resultados y demostraciones matemáticas sobre las propiedades que caracterizan a los cristales clásicos.

Esta clasificación binaria para los sistemas sólidos, así como la teoría sobre la estructura atómica que la sustenta, resultó ser sumamente fructífera y se creía libre de fallos. No fue hasta el año 1984 que los principios fundamentales de la cristalografía se verían amenazados por la publicación de D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.

W. Cahn [2], quienes reportaron la existencia de una aleación de aluminio y manganeso cuyo patrón de difracción era discreto y perfectamente definido, aunque con la particularidad de poseer una simetría rotacional decagonal, simetría prohibida e incompatible con la restricción de poseer una estructura atómica periódica. Esta aparente contradicción sería resuelta al introducir en el campo de la física un área de las matemáticas más relacionada con mosaicos y rompecabezas que con cristales: los teselados cuasiperiódicos.

Los teselados cuasiperiódicos, un caso particular de los teselados aperiódicos, han sido objeto de estudio por parte de la física y las matemáticas por más de 50 años. Su principal característica (el poseer un orden de largo alcance en ausencia de una simetría traslacional) resultó fundamental para generar un modelo teórico que conciliara la existencia de la controversial aleación de aluminio y manganeso con más de un siglo de conocimientos en cristalografía, dando como resultado una nueva definición al concepto de cristal y el nacimiento de una nueva categoría en el estudio y clasificación de los sólidos: los cuasicristales. En el capítulo 3 abordamos los hechos que llevaron al descubrimiento de los cuasicristales, la creación del modelo teórico que los describe, así como un breve recuento sobre su estado del arte.

Este cambio de paradigma con respecto a cómo entendemos al estado sólido trajo consigo una serie de preguntas que a día de hoy se mantienen abiertas, entre las que destaca la posición relativa que ocupan los cuasicristales con respecto a los cristales periódicos y los sólidos amorfos, por ejemplo: ¿Son los sistemas cuasiperiódicos un punto intermedio entre los sistemas periódicos y los sistemas desordenados? ¿Es posible, aumentando la simetría rotacional de los sistemas cuasiperiódicos, acercarnos tanto como deseemos a algún sistema desordenado? Sabemos que los sistemas cuasiperiódicos presentan un orden de largo alcance, por lo que de manera global no es posible que estos se asemejen a un sistema desordenado, sin embargo, cabe la posibilidad de que exista esta semejanza de manera local entre ambos sistemas; si este fuera el caso: ¿Las dimensiones de la vecindad local en la que un sistema se asemeja al otro cambian en función de la simetría rotacional del sistema cuasiperiódico? Estas preguntas motivan el estudio de las propiedades estructurales de los sistemas cuasiperiódicos como función de su simetría rotacional N , en particular en el límite cuando $N \rightarrow \infty$.

A pesar de la importancia que poseen las cuestiones expuestas en el párrafo anterior, y pese a que han pasado más de 40 años desde que tenemos evidencia experimental de la existencia de los sistemas cuasiperiódicos como sistemas físicos reales, la gran mayoría de las investigaciones realizadas en torno a ellos se han limitado a estudiar los casos de baja simetría rotacional [3–5]. Este aparente desinterés por parte de la comunidad científica se explica, en parte, por la dificultad que presentan estos sistemas en ser generados, ya no digamos de manera experimental sino incluso de manera computacional, pues la ausencia de condiciones periódicas a la frontera dificulta su construcción en términos de la memoria y el tiempo de cómputo requeridos. En el capítulo 4 abordamos los detalles de un algoritmo eficiente basado en el método dual generalizado con el cual podemos generar vecindades locales de los sistemas cuasiperiódicos con simetría rotacional N arbitraria alrededor de cualquier punto en el plano. Este algoritmo será la base de las simulaciones y cálculos que presentamos en

esta tesis.

Con el objetivo de responder a las preguntas anteriores, hemos estudiado de manera computacional la distribución de la longitud de vuelos libres de una partícula neutra en diversos gases de Lorentz cuasiperiódicos en el límite de Boltzmann-Grad como función de su simetría rotacional, así como la distribución de la distancia al primer vecino y la distribución del área de las celdas de Voronoi de los sitios de las retículas cuasiperiódicas. Los resultados obtenidos a partir de los puntos anteriores nos sugieren que los sistemas cuasiperiódicos se comportan como sistemas desordenados de manera local, aunque no nos proporcionan información sobre cuál es la escala de longitud en donde dicho comportamiento deja de ser válido. Referente a esta última cuestión, hemos calculado la varianza del número de sitios de las retículas cuasiperiódicas que caen dentro de una ventana circular al ir incrementado su radio, esto con el objetivo de medir su hiperuniformidad, encontrando que todos los casos analizados corresponden a sistemas hiperuniformes en una escala global, aunque con un comportamiento similar al de los sistemas desordenados en una escala local, obteniendo además una expresión matemática para calcular la escala de longitud en la que este segundo comportamiento se hace presente. En el capítulo 5 se presentan estos resultados a mayor profundidad, así como las consideraciones teóricas y los detalles de los algoritmos que los sustentan. Finalmente, en el capítulo 6 presentamos las conclusiones de nuestro trabajo.

2 Cristalografía clásica

La irrupción de los cuasicristales en el marco teórico del estado sólido (así como el concepto de cuasiperiodicidad que los define) no puede entenderse como un hecho aislado, sino que requiere de un mínimo contexto histórico que nos permita comprender la motivación, los problemas y las necesidades que eventualmente llevarían a los físicos a su adopción dentro de la teoría cristalográfica. El presente capítulo tiene como objetivo abordar algunos de los elementos más relevantes en torno al desarrollo de la teoría cristalográfica clásica, partiendo del concepto general de mosaico hasta llegar al método experimental basado en rayos X que permitió clasificar a los sólidos a partir de su estructura atómica, desarrollando en el camino los resultados matemáticos más importantes que dan lugar a la definición clásica de un cristal.

2.1. Sobre mosaicos y teselas

Es posible que las palabras “cuasicristal” o “teselado de Penrose” no tengan significado alguno para el lector en este punto, no obstante, es bastante probable que en algún momento de su vida usted haya visto un mosaico, ya sea como parte del diseño de interiores que se ha empleado para adornar el piso de una casa, o bien, presente en alguna pared como parte de la decoración de la misma. Si este es el caso, tenemos un sólido punto de partida para la construcción de nuestro camino hacia los cuasicristales, pues como veremos más adelante, podemos pensar a estos últimos como un conjunto muy especial de mosaicos a escala atómica. Comencemos entonces revisando las generalidades de un mosaico, siendo algunos de los más famosos aquellos que engalanan las paredes de la Alhambra de Granada en España.

La Alhambra de Granada, como la conocemos hoy en día, fue concebida entre los siglos XIII y XV por mandato del fundador de la dinastía nazarí, Ben Al-Ahmar [6]. Debido a las raíces musulmanas de Al-Ahmar, las representaciones artísticas que integran al complejo monumental de edificios y jardines poseen todas las características del arte islámico de aquella época, destacando de entre estas el uso de la geometría como “elemento estilístico y principio rector” [7]. Es en sus alicatados (término preciso para el tipo de mosaicos presentes en la Alhambra) que salta a simple vista la variedad y complejidad de las tramas geométricas empleadas, como puede apreciarse en los ejemplos contenidos en la figura 2.1.

La idea fundamental detrás de estos alicatados (así como de los mosaicos en general) consiste en recubrir una superficie plana a partir de pequeñas piezas poligonales,



Figura 2.1: Ejemplos de algunos alicatados presentes en la Alhambra de Granada. Imagen recuperada de [7].

asegurándose de no dejar huecos ni superponer una pieza con otra. Estas piezas, conocidas como teselas, determinan en gran medida el patrón final del mosaico, pues su simetría particular juega un papel importante en las simetrías presentes en el diseño final. Debido al nombre dado a estas piezas poligonales, al proceso de recubrir un plano con ellas bajo las condiciones recién mencionadas se le denomina “teselar”.

Viendo el amplio abanico de patrones presentes en la figura 2.1, los cuales parecen extenderse de manera indefinida, uno pudiera tener la sensación de que existe una infinidad de maneras diferentes de teselar el plano a partir de un conjunto finito de teselas distintas, de manera que se respete un patrón geométrico durante toda la teselación, repitiéndose una y otra vez a lo largo del plano. Sin embargo, este no es el caso y la presumible cantidad de “infinitas” maneras de teselar el plano bajo estas condiciones se termina reduciendo a únicamente 17 grupos de formas diferentes (las cuales, como curiosidad, están todas representadas en los alicatados de la Alhambra de Granada).

2.1.1. Breve introducción a las isometrías del plano

Para poder entender de dónde surgen estos 17 grupos diferentes de teselar el plano necesitamos definir unos cuantos conceptos matemáticos y realizar algunas demostraciones formales, contenido que revisaremos en la presente sección así como en el apéndice A. Dicho contenido está basado en los capítulos 24 y 25 de la referencia [8], haciendo explícitos aquellos pasos de las demostraciones que en ella se omiten.

Definición 2.1.1. Una función $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ tal que preserva la distancia entre cualesquiera dos puntos se denomina una isometría del plano. Es decir, para cualesquiera

dos puntos en el plano $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$, se satisface que

$$||g(\vec{x}) - g(\vec{y})|| = ||\vec{x} - \vec{y}||,$$

siendo $|| \cdot ||$ la norma euclidea en el plano.

Teorema 2.1.2. *El conjunto de todas las isometrías del plano, $\mathbf{E}_2$, forman un grupo bajo la composición usual de funciones. A dicho grupo se le conoce como el grupo Euclideo.*

Demostración. Véase el apéndice A.0.1. □

Definición 2.1.3. Una traslación determinada por un vector $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ es una función $\tau : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida como $\tau(\vec{x}) = \vec{v} + \vec{x}$ para todo $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$.

Teorema 2.1.4. *El conjunto de todas las traslaciones forman un subgrupo $\mathbf{T}$ de $\mathbf{E}_2$.*

Demostración. Véase el apéndice A.0.2. □

Definición 2.1.5. Una transformación ortogonal del plano es una función $\omega : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ que puede expresarse como

$$\omega(\vec{x}) = \Omega \vec{x},$$

siendo $\Omega \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ una matriz ortogonal. Al conjunto de todas las transformaciones ortogonales del plano lo denotamos como $\mathbf{O}_2$.

Teorema 2.1.6. *En el plano, toda matriz ortogonal corresponde a una rotación alrededor del origen, o bien, a una reflexión con respecto a una recta que pasa por el origen.*

Demostración. Véase el apéndice A.0.3. □

Teorema 2.1.7. *El conjunto $\mathbf{O}_2$ de todas las transformaciones ortogonales del plano es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$.*

Demostración. Véase el apéndice A.0.4. □

Corolario 2.1.8. *Toda isometría del plano puede expresarse, de manera única, como una de las siguientes composiciones:*

- Una rotación alrededor del origen seguida por una traslación.
- Una reflexión con respecto a una recta que pasa por el origen seguida por una traslación.

Demostración. Véase el apéndice A.0.5. □

Definición 2.1.9. Representamos a una isometría arbitraria $g \in \mathbf{E}_2$ como el par ordenado $(\vec{v}, \Omega)$ donde

$$g(\vec{x}) = \vec{v} + \Omega \vec{x},$$

siendo $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano, $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ un vector en el plano asociado a una traslación y $\Omega \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ una matriz ortogonal asociada a una transformación ortogonal.

Teorema 2.1.10. Sean $(\vec{v}_1, \Omega_1), (\vec{v}_2, \Omega_2) \in \mathbf{E}_2$ dos isometrías arbitrarias en el plano. Expresamos a la composición de isometrías como el siguiente producto entre pares ordenados

$$(\vec{v}_1, \Omega_1)(\vec{v}_2, \Omega_2) = (\vec{v}_1 + \Omega_1\vec{v}_2, \Omega_1\Omega_2).$$

Demostración. Consideremos las isometrías representadas por los pares ordenados $(\vec{v}_1, \Omega_1), (\vec{v}_2, \Omega_2)$

$$g(\vec{x}) = \vec{v}_1 + \Omega_1\vec{x},$$

$$h(\vec{x}) = \vec{v}_2 + \Omega_2\vec{x},$$

siendo $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano.

La composición de isometrías $gh \in \mathbf{E}_2$ queda expresada como

$$gh(\vec{x}) = g(h(\vec{x})) = g(\vec{v}_2 + \Omega_2\vec{x}) = \vec{v}_1 + \Omega_1(\vec{v}_2 + \Omega_2\vec{x}) = \vec{v}_1 + \Omega_1\vec{v}_2 + \Omega_1\Omega_2\vec{x},$$

definiendo al vector $\vec{w} = \vec{v}_1 + \Omega_1\vec{v}_2$ y a la matriz ortogonal $M = \Omega_1\Omega_2$, tenemos que

$$gh(\vec{x}) = \vec{w} + M\vec{x},$$

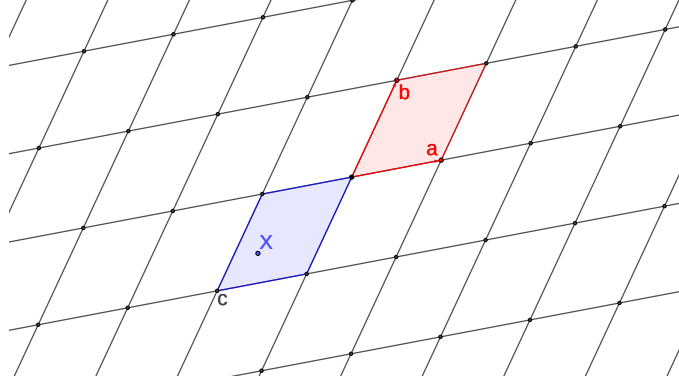
cuya representación como par ordenado es

$$(\vec{w}, M) = (\vec{v}_1 + \Omega_1\vec{v}_2, \Omega_1\Omega_2).$$

□

Definición 2.1.11. Sean $A_\theta = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$ y $B_\phi = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) \\ \sin(\phi) & -\cos(\phi) \end{pmatrix}$ dos matrices ortogonales. Definimos las siguientes isometrías básicas del plano:

- Una *traslación* por un vector $\vec{v}$, expresada como $(\vec{v}, I)$ siendo I la matriz identidad.
- Una *rotación en sentido antihorario* en torno al origen por un ángulo θ , expresada como $(\vec{0}, A_\theta)$.
- Una *reflexión* con respecto a una recta que pasa por el origen y que forma un ángulo $\phi/2$ con respecto al eje positivo de las x , expresada como $(\vec{0}, B_\phi)$.
- Una *rotación en sentido antihorario* en torno al punto $\vec{c}$ por un ángulo θ , expresada como $(\vec{c} - A_\theta\vec{c}, A_\theta)$.
- Una *reflexión* con respecto a una recta que pasa por el punto $\vec{a}$ y que forma un ángulo $\phi/2$ con respecto al eje positivo de las x , expresada como $(2\vec{a}, B_\phi)$.
- Una *reflexión deslizante* como una reflexión con respecto a una recta que pasa por el punto $\vec{a}$ y que forma un ángulo $\phi/2$ con respecto al eje positivo de las x , seguida por una traslación determinada por el vector $\vec{b}$ a lo largo de esa misma línea. Expresamos esta isometría como $(2\vec{a} + \vec{b}, B_\phi)$

Figura 2.2: Red generada por los vectores $\vec{a}$ y $\vec{b}$.

Definición 2.1.12. Sea $\mathbf{G}$ un subgrupo arbitrario de $\mathbf{E}_2$ y sea $\pi : \mathbf{E}_2 \rightarrow \mathbf{O}_2$ la función definida por $\pi(\vec{v}, \Omega) = \Omega$. Definimos los siguientes conjuntos:

- El *subgrupo de traslaciones* $\mathbf{H}$ de $\mathbf{G}$, determinado por el conjunto $\mathbf{G} \cap \mathbf{T}$.
- El *grupo puntual* $\mathbf{J}$ de $\mathbf{G}$, determinado por $\pi(\mathbf{G})$, conformado por todas las matrices ortogonales asociadas a las isometrías de $\mathbf{G}$.

Definición 2.1.13. Un subgrupo de $\mathbf{E}_2$ es denominado un *grupo cristalográfico plano* $\mathbf{Q}$ si su subgrupo de traslaciones $\mathbf{H}$ es generado por dos vectores independientes y su grupo puntual $\mathbf{J}$ es finito.

Definición 2.1.14. Denotamos por L a la órbita del origen bajo la acción del subgrupo de traslaciones $\mathbf{H}$ de $\mathbf{G}$. Esto es, $L = \{\vec{v} \mid (\vec{v}, I) \in \mathbf{H}\}$

Teorema 2.1.15. Sea L la órbita del origen generada por $\mathbf{H}$ de un grupo cristalográfico $\mathbf{Q}$. Por la definición de $\mathbf{Q}$ existen al menos dos vectores independientes en L . Sea $\vec{a} \in L$ el vector no nulo de menor norma del conjunto y sea $\vec{b} \in L$ un vector no paralelo a $\vec{a}$ de la menor norma posible. Entonces, el conjunto L es la red generada por todas las combinaciones lineales de $\vec{a}$ y $\vec{b}$ con coeficientes enteros.

Demostración. Considerando el resultado del teorema 2.1.10, podemos observar que la correspondencia entre $(\vec{x}, I) \rightarrow \vec{x}$ es un isomorfismo entre el grupo de las traslaciones en el plano $\mathbf{T}$ y $\mathbb{R}^2$ bajo la suma usual de vectores, el cual manda el subgrupo $\mathbf{H}$ al conjunto L . De esta manera, L es un subgrupo de $\mathbb{R}^2$ y por lo tanto, todo punto de la forma $m\vec{a} + n\vec{b}$ de la red generada por los vectores $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^2$, con $m, n \in \mathbb{Z}$, está contenido en L . Usando los puntos de esta red podemos segmentar al plano en paralelogramos como se puede ver en la figura 2.2. Estos paralelogramos los definimos de tal forma que contienen todos los puntos en su interior, así como los puntos de su frontera.

Supongamos que existe un punto $\vec{x} \in L$ que no forma parte de la red generada por $\vec{a}$ y $\vec{b}$; este punto $\vec{x}$ formará parte de los puntos que conforman a algún paralelogramo. Sea $\vec{c}$ el vértice más cercano a $\vec{x}$ del paralelogramo que lo contiene. Tenemos entonces que el vector $\vec{x} - \vec{c}$ no es el vector cero, ni es igual a los vectores $\vec{a}$ o $\vec{b}$ (pues caso

contrario formaría parte de la red generada por $\vec{a}$ y $\vec{b}$), además de que su norma es menor que $\|\vec{b}\|$ (por la elección que hicimos de $\vec{c}$). No obstante, $\vec{x} - \vec{c}$ pertenece a L puesto que L es un grupo y por hipótesis $\vec{x}, \vec{c} \in L$. Por un lado, tenemos que $\|\vec{x} - \vec{c}\|$ debe ser mayor o igual a $\|\vec{a}\|$, pues por construcción solicitamos que $\vec{a}$ fuera el vector no nulo de menor norma del conjunto L ; por otro lado, si $\|\vec{a}\| \leq \|\vec{x} - \vec{c}\| < \|\vec{b}\|$, entonces $\vec{x} - \vec{c}$ es un vector no paralelo a $\vec{a}$ de norma menor que la norma de $\vec{b}$, lo cual es una contradicción a la manera en la que elegimos al vector $\vec{b}$. Por lo tanto, no puede existir un punto $\vec{x} \in L$ que no forme parte de la red generada por $\vec{a}$ y $\vec{b}$. $\square$

Definición 2.1.16. Considerando los diferentes casos para las relaciones que existen entre los vectores $\vec{a}$ y $\vec{b}$, correspondientes a todos los posibles paralelogramos que se pueden formar a partir de ellos, definimos las siguientes posibles redes L (a estas redes se les conoce como “redes de Bravais”):

- *Oblicua:* $\|\vec{a}\| < \|\vec{b}\| < \|\vec{a} - \vec{b}\| < \|\vec{a} + \vec{b}\|$,
- *Rectangular:* $\|\vec{a}\| < \|\vec{b}\| < \|\vec{a} - \vec{b}\| = \|\vec{a} + \vec{b}\|$,
- *Rectangular centrada en el vértice:* $\|\vec{a}\| < \|\vec{b}\| = \|\vec{a} - \vec{b}\| < \|\vec{a} + \vec{b}\|$,
- *Cuadrada:* $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| < \|\vec{a} - \vec{b}\| = \|\vec{a} + \vec{b}\|$,
- *Hexagonal:* $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| = \|\vec{a} - \vec{b}\| < \|\vec{a} + \vec{b}\|$,

donde $\vec{a}$ y $\vec{b}$ son dos lados del paralelogramo, mientras que $\vec{a} - \vec{b}$ y $\vec{a} + \vec{b}$ son sus diagonales (puede ser necesario reemplazar el vector $\vec{b}$ por $-\vec{b}$ para garantizar que $\|\vec{a} - \vec{b}\| \leq \|\vec{a} + \vec{b}\|$). Véase la figura 2.3.

Nota: Pudiera parecer que se ha omitido el caso correspondiente a $\|\vec{a}\| = \|\vec{b}\| < \|\vec{a} - \vec{b}\| < \|\vec{a} + \vec{b}\|$, sin embargo, en este escenario el paralelogramo que se forma es un rombo, el cual es una figura geométrica con la propiedad de que sus diagonales se intersecan en ángulos rectos, con lo cual caeríamos en el caso de una red rectangular centrada en el vértice, véase el ejemplo (f) en la figura 2.3.

Teorema 2.1.17. *El grupo puntual $\mathbf{J}$ de un grupo cristalográfico plano $\mathbf{Q}$ preserva la red L ; es decir, si $\Omega \in \mathbf{J}$ y $\vec{x} \in L$, entonces $\vec{y} = \Omega\vec{x} \in L$.*

Demostración. Mostremos que la función $\pi : \mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{J}$ es un homomorfismo. Sean $(\vec{v}_1, \Omega_1), (\vec{v}_2, \Omega_2) \in \mathbf{Q}$ dos isometrías del plano arbitrarias, tenemos que

$$\pi((\vec{v}_1, \Omega_1)(\vec{v}_2, \Omega_2)) = \pi((\vec{v}_1 + \Omega_1\vec{v}_2, \Omega_1\Omega_2)) = \Omega_1\Omega_2, \quad (2.1)$$

mientras que, al operar por separado cada elemento de $\mathbf{Q}$, tenemos

$$(\pi((\vec{v}_1, \Omega_1)))(\pi((\vec{v}_2, \Omega_2))) = (\Omega_1)(\Omega_2) = \Omega_1\Omega_2, \quad (2.2)$$

dado que $(\vec{v}_1, \Omega_1), (\vec{v}_2, \Omega_2)$ son dos elementos arbitrarios y se satisface la igualdad entre 2.1 y 2.2, concluimos que π es un homomorfismo entre $\mathbf{Q}$ y $\mathbf{J}$. Además, para

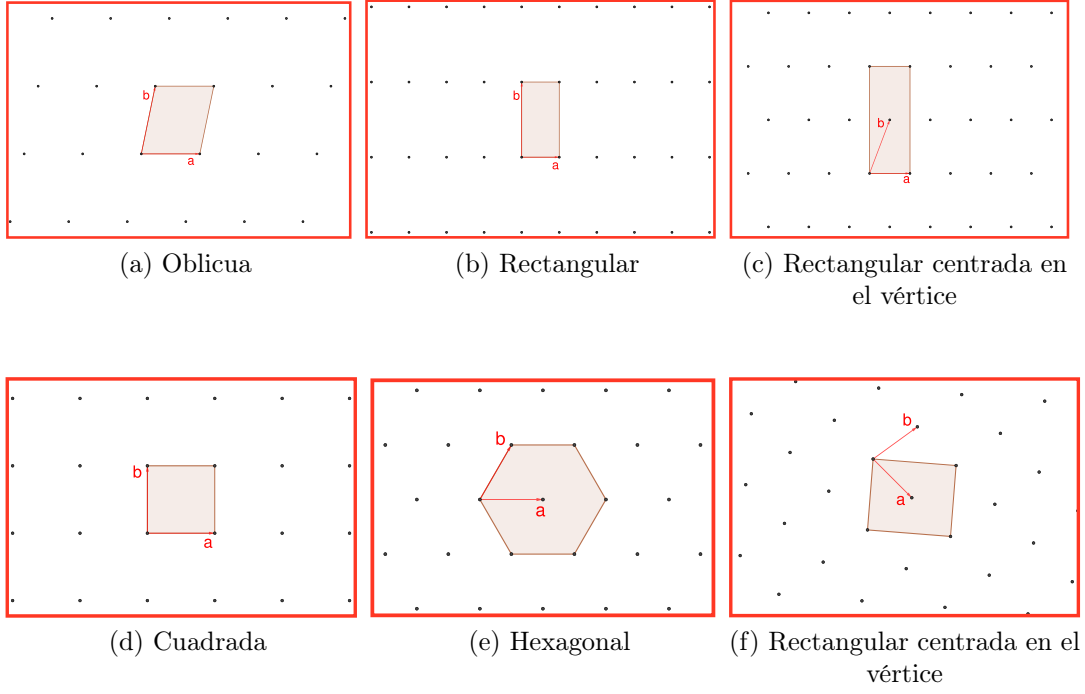


Figura 2.3: Ejemplos de las diferentes redes L asociadas a los elementos $\mathbf{Q}$ del grupo cristalográfico plano. El caso (f) es una variación al caso (c).

cualquier $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$, se satisface que $\pi((\vec{v}, I)) = I$ (siendo I la matriz identidad), por lo que $\mathbf{H} = \text{kernel}(\pi)$.

Sea $\Omega \in \mathbf{J}$ y $\vec{x} \in L$ de modo que $g = (\vec{v}, \Omega) \in \mathbf{Q}$ y $\tau = (\vec{x}, I) \in \mathbf{H}$. Tenemos que

$$\begin{aligned}
 g\tau g^{-1} &= (\vec{v}, \Omega)(\vec{x}, I)(-\Omega^{-1}\vec{v}, \Omega^{-1}) \\
 &= (\vec{v}, \Omega)(\vec{x} + I(-\Omega^{-1}\vec{v}), I\Omega^{-1}) \\
 &= (\vec{v}, \Omega)(\vec{x} - \Omega^{-1}\vec{v}, \Omega^{-1}) \\
 &= (\vec{v} + \Omega(\vec{x} - \Omega^{-1}\vec{v}), \Omega\Omega^{-1}) \\
 &= (\vec{v} + \Omega\vec{x} - \Omega\Omega^{-1}\vec{v}, I) \\
 &= (\vec{v} + \Omega\vec{x} - \vec{v}, I) = (\Omega\vec{x}, I), \\
 &\implies g\tau g^{-1} = (\Omega\vec{x}, I). \tag{2.3}
 \end{aligned}$$

De la igualdad 2.3 tenemos que $\pi(g\tau g^{-1}) = I$, por lo que $g\tau g^{-1} \in \mathbf{H}$. Por el teorema 2.1.15, esto implica que $\Omega\vec{x} \in L$ con lo que concluye la demostración. $\square$

Teorema 2.1.18. *El orden de las rotaciones válidas dentro de un grupo cristalográfico plano sólo puede ser 2, 3, 4 o 6. A este resultado se le conoce como la restricción cristalográfica.*

Demostración. Toda rotación en un grupo cristalográfico plano $\mathbf{Q}$ tiene un orden finito (pues por definición, su grupo puntual $\mathbf{J}$ es finito). Si tenemos una rotación de orden $q \in \mathbb{Z}^+$, su representación matricial sería aquella correspondiente a una rotación en sentido antihorario por un ángulo de $2\pi/q$, de modo que la matriz

$$A = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) & -\sin\left(\frac{2\pi}{q}\right) \\ \sin\left(\frac{2\pi}{q}\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) \end{pmatrix} \in \mathbf{J}.$$

Siendo consistentes con la notación empleada en el teorema 2.1.15 y la definición 2.1.16, sea $\vec{a} \in \mathbb{R}^2$ el vector no nulo de menor norma del conjunto L asociado a $\mathbf{Q}$. Como $A \in \mathbf{J}$ y $\mathbf{J}$ preserva la red L , entonces $A\vec{a} \in L$. Supongamos que $q > 6$, entonces $2\pi/q < 60^\circ$ y $A\vec{a} - \vec{a}$ es un elemento en L de norma menor a la de $\vec{a}$, lo cual es una contradicción a la elección que hicimos de $\vec{a}$. Para demostrar esta aseveración, consideremos sin pérdida de generalidad que $\vec{a} = (1, 0)$, entonces $\|\vec{a}\| = 1$; bajo estas consideraciones, tenemos que

$$\begin{aligned} A\vec{a} - \vec{a} &= \left(\cos\left(\frac{2\pi}{q}\right), \sin\left(\frac{2\pi}{q}\right) \right) - (1, 0) = \left(\cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) - 1, \sin\left(\frac{2\pi}{q}\right) \right), \\ \implies \|A\vec{a} - \vec{a}\|^2 &= \left(\cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) - 1 \right)^2 + \sin^2\left(\frac{2\pi}{q}\right) \\ &= \cos^2\left(\frac{2\pi}{q}\right) - 2\cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) + 1 + \sin^2\left(\frac{2\pi}{q}\right) \\ &= 2 - 2\cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) = 2 \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) \right), \end{aligned}$$

estamos interesados en aquellos valores de q tales que $\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) \right) < 1/2$, pues de esta manera $\|A\vec{a} - \vec{a}\|^2 < 2(1/2) = 1$, lo que implicaría, tomando la raíz cuadrada de ambos lados de la desigualdad, que $\|A\vec{a} - \vec{a}\| < 1 = \|\vec{a}\|$ siendo este el resultado que buscamos. Entonces, despejando q y manteniéndonos en el intervalo angular de 0 a 2π , tenemos que

$$\begin{aligned} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) \right) &< \frac{1}{2}, \implies \cos\left(\frac{2\pi}{q}\right) > \frac{1}{2}, \\ \implies \frac{2\pi}{q} &< \arccos\left(\frac{1}{2}\right), \implies \frac{2\pi}{q} < \frac{\pi}{3}, \\ \implies \frac{2}{q} &< \frac{1}{3}, \implies 6 < q, \end{aligned}$$

en donde hemos empleado el hecho de que la función $\arccos(x)$ es decreciente al cambiar el signo de la desigualdad al aplicar la función a ambos lados.

El caso de $q = 5$ pudiera parecer que es válido dado el argumento anterior, sin embargo, el mismo problema se presenta en este caso cuando consideramos al elemento

$A^2\vec{a} + \vec{a}$ pues, al aplicar dos veces la matriz de rotación A al vector $\vec{a}$, el ángulo que se forma entre $A^2\vec{a}$ y $-\vec{a}$ es igual a 36° ; como este ángulo es menor que 60° , estamos en el mismo caso que en el párrafo anterior sustituyendo $A\vec{a}$ por $A^2\vec{a}$ y $\vec{a}$ por $-\vec{a}$, por lo que $\|A^2\vec{a} + \vec{a}\| < \|\vec{a}\|$, cayendo nuevamente en una contradicción. $\square$

Corolario 2.1.19. *El grupo puntual $\mathbf{J}$ de cualquier grupo cristalográfico plano $\mathbf{Q}$ es generado por una rotación de un ángulo $\theta \in \{0, \pi, 2\pi/3, \pi/2, \pi/3\}$ más alguna posible reflexión.*

2.1.2. Las 17 formas de teselar el plano

Antes de continuar con nuestra exposición, recapitulemos y pongamos en palabras simples los resultados obtenidos en la sección anterior. Una isometría, a pesar de lo rimbombante de su nombre, no es más que la definición formal de aquellas manipulaciones que podemos realizar al mover un objeto rígido sobre una superficie plana. En el contexto de los mosaicos y las teselas, piense en las isometrías como el nombre matemático para describir los movimientos que se pueden realizar con cada tesela al acomodarla para formar un mosaico: usted puede desplazar la pieza por todo el plano, puede girar la pieza por algún ángulo e incluso puede “reflejar” su pieza si la voltea (aunque para realizar esto es necesario que separe la pieza del plano, la gire en el espacio tridimensional y la vuelva a colocar en el plano). En todos estos ejemplos, la forma y las dimensiones de la pieza no se ven modificadas, propiedad que se captura en la definición formal de isometría al pedir que la distancia entre cualesquiera dos puntos se preserve. El resto de la sección consistió únicamente en explorar las características y propiedades de las diferentes isometrías.

Entre estas propiedades, destacan las siguientes por su relevancia en la discusión que estamos construyendo:

- Sólo existen 5 categorías (redes de Bravais) en las que se pueden clasificar los mosaicos que se pueden construir a partir de dos desplazamientos independientes en el plano, siendo estos: oblicuos, rectangulares, rectangulares centrados en el vértice, cuadrados y hexagonales. Véase la figura 2.3.
- Cualquier mosaico que se construya a partir de dos desplazamientos independientes en el plano sólo aceptará simetrías rotacionales por ángulos de 0 , π , $2\pi/3$, $\pi/2$ o $\pi/3$ radianes. Estas simetrías rotacionales, salvo la asociada a un ángulo 0 que en realidad es equivalente a no rotar, se corresponden a la simetría de dos líneas paralelas, un triángulo equilátero, un cuadrado y un hexágono, respectivamente.

Este último resultado es esencial para entender el rompimiento del paradigma que ocasionaron los cuasicristales y no es posible exagerar la importancia que tiene para la presente tesis. Más adelante retomaremos este punto, de momento basta mencionarlo como uno de los resultados fundamentales en el estudio de las isometrías del plano.

Es a partir de estas 5 redes de Bravais que se derivan los 17 grupos de teselaciones posibles del plano como resultado de combinar cada una de las distintas categorías

con sus rotaciones compatibles, así como la incorporación (o ausencia) de reflexiones y reflexiones deslizantes en sus conjuntos de isometrías. Por ejemplo, el primero de estos grupos (denotado como el grupo $p1$) está conformado por las redes generadas a partir de las celdas unitarias de las 5 redes de Bravais, empleando únicamente traslaciones; mientras que el segundo de estos grupos (denotado como el grupo $p2$) está conformado por las redes generadas a partir de estas mismas 5 celdas unitarias, pero añadiendo rotaciones por un ángulo de π radianes al conjunto de isometrías permitidas.

La demostración formal de esta afirmación requiere nuevamente del uso de matemáticas no triviales y probar cada uno de los 17 grupos (resultado de combinar diferentes subconjuntos de redes de Bravais con todos los posibles subgrupos de sus isometrías compatibles) consumiría demasiado espacio, incluso para un apéndice, por lo que referimos al lector interesado en estudiar las demostraciones concernientes a estos casos al capítulo 26 de la referencia [8], así como a la referencia [9], la cual contiene múltiples ejemplos de los diferentes grupos en teselados y mosaicos reales.

2.2. Sobre cristales y mosaicos

Hoy en día, la idea de que las matemáticas son parte indispensable e inseparable del desarrollo científico de cualquier rama de la ciencia nos resulta muy natural, sobre todo en la física, en donde hemos sido testigos como humanidad del impresionante poder de predicción que han alcanzado las distintas teorías matemáticas al comprobarse experimentalmente a lo largo de la historia. Galileo Galilei, en su libro “Il Saggiatore” publicado en 1623, refleja los comienzos de esta corriente de pensamiento en una de sus citas más célebres:

La filosofía está escrita en ese grandísimo libro que tenemos abierto ante los ojos, quiero decir, el universo, pero no se puede entender si antes no se aprende a entender la lengua, a conocer los caracteres en los que está escrito. Está escrito en lengua matemática y sus caracteres son triángulos, círculos y otras figuras geométricas, sin las cuales es imposible entender ni una palabra; sin ellos es como girar vanamente en un oscuro laberinto [10].

Esta frase en concreto podría leerse casi como una profecía sobre la manera en la que describimos a la naturaleza y los fenómenos que en ella ocurren, pues resulta cuando menos interesante que los resultados matemáticos obtenidos de manera ajena a cualquier realidad física suelen ajustarse bastante bien como modelos descriptivos de esta última. Tal es el caso de la cristalografía clásica, cuya historia comienza en 1781 cuando un sacerdote católico francés de nombre René Just Haüy diera comienzo a una serie de experimentos con minerales, de cuyos resultados se obtendrían las bases sobre las que se edificaría dicha área.

Narran las crónicas sobre la vida y obra de Haüy [11] que, posterior a presenciar una conferencia sobre minerales impartida por Louis-Jean-Marie Daubenton (médico, anatomista, mineralogista y naturalista francés), solicitó a Jacques de France de Croisset permiso para examinar su colección privada de minerales, sufriendo durante esta visita uno de los accidentes más felices para el desarrollo de la ciencia al dejar

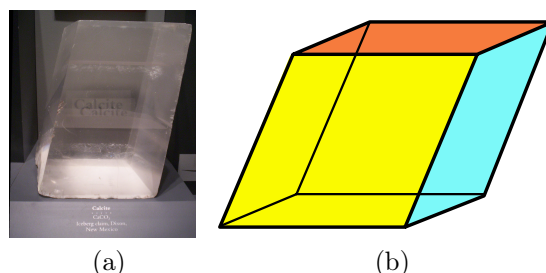


Figura 2.4: Fotografía de una muestra de calcita en donde se aprecian sus caras lisas y planas que la conforman (a). A su derecha, un romboedro, figura tridimensional similar a un cubo, con la diferencia de que sus 6 caras son rombos en lugar de cuadrados (b).

Imágenes recuperadas de <https://es.wikipedia.org/wiki/Calcita> y <https://es.wikipedia.org/wiki/Romboedro>, respectivamente.

caer al piso un ejemplar de calcita, mismo que resultó segmentado en distintas piezas a consecuencia del impacto. Seguramente Haüy no fue la primera persona que de manera accidental o deliberada haya fragmentado una muestra de algún mineral, no obstante, sería la primer persona en observar detenidamente cada una de las piezas resultantes y dar comienzo a un estudio sistemático de cómo es que están conformados los minerales en su interior. Lo que llamó la atención de Haüy fue el hecho de que las superficies de los fragmentos del mineral donde la muestra original se separó eran en todos los casos lisas y con ángulos bien definidos, contrario a la superficie rugosa y más bien caótica que presentaba inicialmente el mineral. Con el visto bueno de su anfitrión, Haüy pudo conservar los fragmentos de la calcita y, una vez en su habitación, comenzó a remover las capas exteriores de estos hasta conseguir que las muestras exhibieran caras planas y lisas. En todos los fragmentos sujetos a este sencillo experimento el resultado fue el mismo: la muestras exhibían una forma geométrica conocida como “romboedro”, véase la figura 2.4.

Haüy eventualmente logró realizar este mismo procedimiento a diferentes muestras de calcita recolectadas en distintas zonas geográficas a lo largo del mundo, así como a diversos minerales. El resultado se mantuvo invariable, al menos en su esencia, pues aunque podía haber cambios en la figura geométrica obtenida al final del experimento dependiendo del mineral que se analizaba (a veces un tetraedro, en otras ocasiones un prisma triangular o bien, un paralelepípedo), en todos los casos, para un mismo mineral, se obtenía una misma figura tridimensional perfectamente definida. La explicación más simple a la que pudo llegar fue que, por alguna razón cuyos motivos quedaban fuera de su comprensión, los minerales estaban constituidos por algún bloque básico (al que llamó “la molécule intégrante”), el cual se repetía a lo largo de toda su estructura. Estas conclusiones, así como todos los resultados obtenidos a lo largo de las iteraciones de su experimento, fueron publicadas en 1801 en su obra magna titulada “Traité de Minéralogie”.

Esta idea, la existencia de un bloque a partir del cual se va construyendo la estructura interna de los minerales al acoplar entre sí copias de dicho bloque, nos recuerda

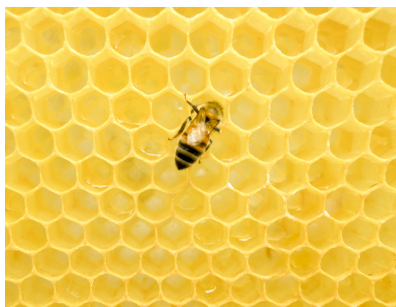


Figura 2.5: Fotografía de un panal de abeja. Nótese la estructura hexagonal que forman las celdas de cera, la cual se mantiene invariante sin importar en qué celda nos fijemos.

Imagen recuperada de <https://en.wikipedia.org/wiki/Honeycomb>.

a los mosaicos y su conjunto de teselas a partir de las cuales, colocando una seguida de la otra, se va construyendo el teselado del plano. Esta semejanza se ve reforzada al considerar que no todas las figuras geométricas pueden surgir como bloque fundamental en los minerales, similar a la cantidad limitada de posibles redes que aparecen en el estudio de las isometrías del plano (generalizando los procedimientos realizados en la sección anterior, es posible demostrar que para el caso tridimensional existen 230 grupos de maneras de cubrir el espacio, considerando las mismas restricciones que en el caso de los teselados del plano [1]). A partir de este conjunto de ideas, experimentos y teorías, se fundó la rama de la física conocida como “cristalografía”, la cual se encargaría de estudiar las propiedades físicas como la conducción térmica, la conducción eléctrica, la elasticidad, la dureza, entre otras, de aquellos sistemas cuya estructura interna estuviera descrita por este “teselado tridimensional”.

2.2.1. Radiografía a un cristal

Tanto si hablamos de teselados en el plano como de su símil en el espacio, una de las isometrías más simples que podemos expresar (obviando la isometría trivial que consiste en no hacer absolutamente nada) es la traslación por algún vector. Es precisamente a partir de esta operación que se derivan las 5 redes de Bravais en el plano y juegan el mismo papel determinante en el caso tridimensional. La presencia de estas isometrías es la responsable de que en ambos casos exista una simetría traslacional. En términos simples, una simetría traslacional (o periodicidad espacial) es la propiedad de un sistema de repetirse a sí mismo al desplazarnos una cierta longitud en algunas direcciones particulares, piense por ejemplo en el diseño de las hojas de cualquier libreta cuadriculada o, siendo un poco más permisivos ante pequeñas variaciones (mismas que discutiremos un poco más en el siguiente capítulo), en el patrón presente en los panales de abeja (véase la figura 2.5).

Al ser la periodicidad espacial una consecuencia directa de las isometrías de traslación y siendo las isometrías en su conjunto la base sobre la que se construye el modelo matemático de la cristalografía, resultaba natural el definir a los cristales como aquellos sólidos cuya estructura atómica consiste en un arreglo periódico de sus átomos. Esta hipótesis, tomada como un principio fundamental en la teoría crista-



Figura 2.6: Radiografía de la mano de Anna Bertha Röntgen. Imagen recuperada de <https://en.wikipedia.org/wiki/Radiography>.

lográfica clásica, fue sumamente fructífera en términos teóricos, pues los resultados obtenidos a partir de asumirla como cierta generaban predicciones sobre las propiedades presentes en los sistemas físicos reales que se ajustaban bastante bien a las mediciones experimentales; sin embargo, uno de los puntos críticos que consolidarían esta visión sobre la estructura interna de los cristales vendría años más tarde, tras el descubrimiento en 1895 de los rayos X a manos del físico alemán Willhelm Conrad Röntgen (aunque la mano de su esposa, Anna Bertha Röntgen, pasaría igualmente a la historia tras formar parte de uno de los primeros experimentos realizados sobre este tema, véase la figura 2.6).

En la actualidad, los rayos X nos resultan familiares para la mayoría de las personas, en gran parte por sus maravillosas aplicaciones en la medicina, área en la que son utilizados principalmente para poder visualizar los tejidos y huesos del interior del cuerpo humano. Esta capacidad de “fotografiar” la estructura interna de las personas tiene su análogo en los sólidos, aunque en estos últimos el principio físico que hay detrás está relacionado con la difracción y no con la absorción (como es el caso de las aplicaciones médicas) de estos rayos. La historia sobre el descubrimiento y estudio de los rayos X es fascinante, lamentablemente incluirla a detalle en esta sección nos desviaría demasiado del tema central, por lo que sólo haremos mención de los puntos más relevantes con respecto a los cristales (para el lector interesado, el capítulo 3 de la referencia [12] se dedica completamente a la revisión histórica de este desarrollo teórico/experimental).

Hacia 1910, el debate acerca de si los rayos X eran en realidad una onda o un cúmulo de partículas se mantenía abierto, con resultados experimentales contradictorios entre sí que apoyaban una u otra postura (hoy día, a la luz de la teoría cuántica, sabemos que en realidad no hay contradicción entre los experimentos, siendo los rayos X tanto ondas como partículas). Fue en 1912 que Max von Laue, físico de nacionalidad alemana, cayó en cuenta de que si los rayos X eran en realidad ondas electromagnéticas de longitud de onda muy corta (como algunos experimentos sugerían), entonces tendrían que difractarse si se hacían pasar por alguna red con espaciamientos entre

sus elementos del mismo orden de magnitud que dicha longitud de onda, siendo las supuestas estructuras atómicas de los cristales un candidato ideal. El experimento fue llevado a cabo ese mismo año por Múnich Walter Friedrich y Paul Knipping, siendo un éxito y demostrando la naturaleza como onda electromagnética de los rayos X, con una longitud de onda entre los 0.01 nm y los 10 nm [12]. Este resultado le valdría el Premio Nobel a Laue en 1914 por su “descubrimiento sobre la difracción de rayos X por cristales” [13].

2.2.2. Breve repaso de estado sólido

Los resultados obtenidos por el experimento de Friedrich y Knipping serían cruciales para confirmar la existencia de una estructura atómica periódica en los cristales, dando comienzo a una metodología experimental para clasificar a los sólidos de acuerdo al patrón de difracción generado por ellos. Para poder interpretar dichos resultados, es necesario contar con algunas herramientas y resultados previos propios del estado sólido y la óptica. Demos comienzo a la revisión de estos temas con la denominada “ley de Bragg”.

Ley de Bragg

Supongamos que tenemos un cristal constituido por planos paralelos en los que se distribuyen sus átomos en una red periódica. A dicho cristal le hacemos incidir una onda electromagnética plana con cierta longitud de onda λ , de modo que al interactuar con los átomos de cada uno de los planos del cristal, parte de la onda será reflejada de manera especular (como si se tratara de un espejo), mientras que la otra parte continuará con su trayectoria inicial. Las partes reflejadas por la interacción con cada plano viajarán en trayectorias paralelas entre sí pero, a causa de la separación entre los planos, el camino óptico que habrán recorrido cada una de estas ondas al impactar en una pantalla de visualización será diferente. Por ejemplo, véase la figura 2.7, en donde en color rojo se han señalado dos posibles trayectorias para las ondas electromagnéticas en fase que inciden en el cristal por el lado izquierdo, siendo reflejadas en el primer y segundo plano. Si consideramos que la separación entre los planos es d y que el ángulo que forman las ondas electromagnéticas con los planos al incidir en estos es θ , podemos observar que la onda reflejada en el segundo plano recorrerá dos segmentos adicionales con respecto a la onda reflejada en el primer plano, cada uno de magnitud $d \sin(\theta)$.

Esta distancia adicional que recorrerá una onda con respecto a la otra es importante para determinar si la interferencia que generan al llegar a la pantalla de visualización será constructiva o destructiva, esto es, si la amplitud de las ondas se suman (al coincidir los valles y las crestas de una y otra) o si se restan (al coincidir los valles de una onda con las crestas de la otra). Para el caso de una onda plana, podemos expresar su evolución espacio-temporal a través de la siguiente función

$$f(t, \vec{x}) = A \cos \left(\omega(t - t_0) - \vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) + \psi_0 \right), \quad (2.4)$$

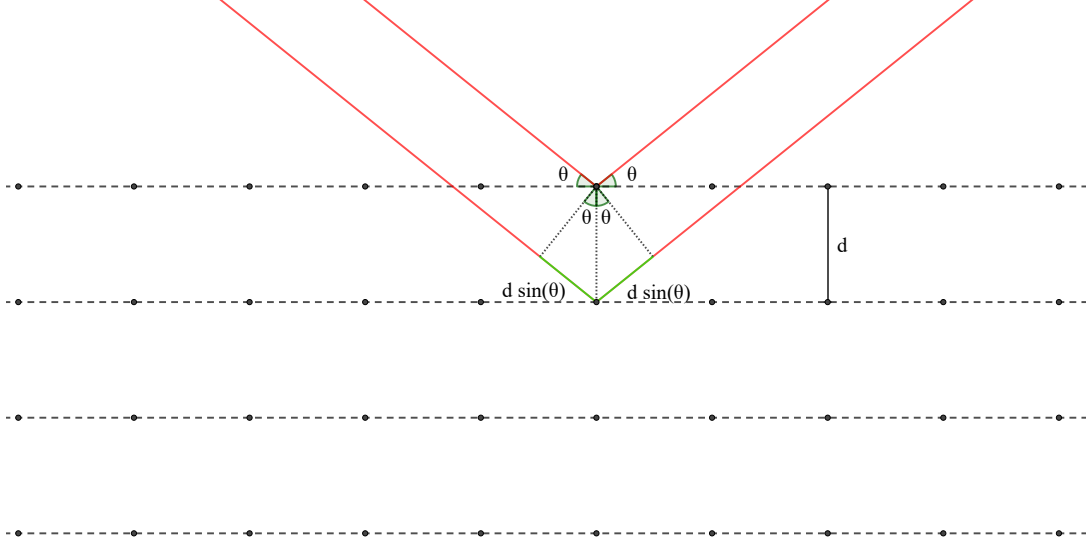


Figura 2.7: Visualización simplificada de la diferencia en el camino óptico recorrido por dos ondas electromagnéticas siendo reflejadas por distintos planos de un cristal.

donde t representa el tiempo, $\vec{x}$ es el vector de posición, t_0 y $\vec{x}_0$ el tiempo y posición iniciales, A es la amplitud de la onda, ω es la frecuencia angular, $\vec{k}$ es el vector de onda y ψ_0 es la fase inicial de la onda, asociada a t_0 y $\vec{x}_0$. Al conjunto de términos que se encuentran dentro del argumento del coseno se les denomina “la fase de la onda”.

Para que las ondas interfieran constructivamente, sus fases deben ser tales que se satisfaga la condición

$$\cos \left(\omega(t - t_0) - \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_p - \vec{x}_{0,1}) + \psi_0 \right) = \cos \left(\omega(t - t_0) - \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_p - \vec{x}_{0,2}) + \psi_1 \right),$$

donde la expresión de la izquierda corresponde a la onda reflejada por el primer plano, la expresión de la derecha corresponde a la onda reflejada por el segundo plano, $\vec{x}_p$ corresponde a algún punto sobre la pantalla de visualización y $\vec{k}_r$ hace referencia al vector de onda tras la reflexión. Nótese que la posición inicial es distinta en cada expresión pues el sitio en el que se origina la onda reflejada varía entre un caso y el otro, además de que la fase inicial en ambas ondas es diferente, siendo $\psi_1 = \psi_0 - \Delta\psi$, con $\Delta\psi$ el desfase producido por el segmento adicional que recorrió la onda que se refleja en el segundo plano antes de ser reflejada. Debido a que la función coseno es periódica con periodo igual a 2π , la igualdad anterior queda expresada como

$$\omega(t - t_0) - \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_p - \vec{x}_{0,1}) + \psi_0 = \omega(t - t_0) - \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_p - \vec{x}_{0,2}) + \psi_0 - \Delta\psi + 2\pi n,$$

con $n \in \mathbb{Z}^+$. Agrupando términos, esta igualdad se reduce a

$$\begin{aligned} \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_p - \vec{x}_{0,2} - \vec{x}_p + \vec{x}_{0,1}) + \Delta\psi &= 2\pi n, \\ \implies \vec{k}_r \cdot (\vec{x}_{0,1} - \vec{x}_{0,2}) + \Delta\psi &= 2\pi n, \end{aligned} \tag{2.5}$$

ahora bien, el vector de onda tiene una dirección igual a la dirección de propagación de la onda reflejada (cualquiera de las dos, recordemos que ambas siguen trayectorias paralelas), con una magnitud igual a $2\pi/\lambda$, mientras que el vector $\vec{x}_{0,1} - \vec{x}_{0,2}$ es un vector cuya dirección es igual a la del segmento que va del punto donde se origina la onda que es reflejada en el segundo plano hacia el punto donde se origina la onda que es reflejada en el primer plano, con una magnitud igual a d . La proyección del vector $\vec{x}_{0,1} - \vec{x}_{0,2}$ sobre el vector $\vec{k}_r$ corresponde pues al producto de sus magnitudes por el coseno del ángulo que hay entre ellos, siendo este $\pi/2 - \theta$. Con esta consideración, tenemos que la condición 2.5 se puede expresar como

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\lambda}d \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) + \Delta\psi &= 2\pi n, \\ \implies \frac{2\pi}{\lambda}d \sin(\theta) + \Delta\psi &= 2\pi n. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Como mencionamos anteriormente, el desfase $\Delta\psi$ viene dado por el segmento adicional que recorre la onda antes de ser reflejada en el segundo plano con respecto a la trayectoria que siguió la onda antes de ser reflejada en el primer plano. De esta manera, tenemos que este desfase está dado por

$$\Delta\psi = \vec{k}_i \cdot \Delta\vec{x}_i,$$

donde $\vec{k}_i$ es el vector de onda asociado a la onda incidente al cristal y $\Delta\vec{x}_i$ es el vector asociado al segmento adicional recorrido por la onda. En este caso, ambos vectores son colineales, por lo que su producto punto es únicamente el producto de sus magnitudes, quedando así

$$\Delta\psi = \frac{2\pi}{\lambda}d \sin(\theta),$$

sustituyendo esta expresión en 2.6, tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\lambda}d \sin(\theta) + \frac{2\pi}{\lambda}d \sin(\theta) &= 2\pi n, \\ \implies \frac{2d}{\lambda} \sin(\theta) &= n, \\ \implies 2d \sin(\theta) &= n\lambda, \end{aligned} \quad (2.7)$$

siendo esta la ley de Bragg, la cual nos indica que la diferencia del camino óptico entre dos ondas en fase reflejadas en planos distintos de un cristal debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda para que exista una interferencia constructiva.

Análisis de Fourier

Muchos de los resultados importantes en el estudio de los cristales parten de la hipótesis de que su distribución atómica posee simetría traslacional, es decir, es periódica en el espacio. Esta periodicidad resulta ideal para el uso de herramientas matemáticas tales como el análisis de Fourier, cuyos aspectos clave son expuestos en

la presente sección. Para el desarrollo de los siguientes párrafos se ha tomado como referencia principal el texto de Kittel sobre estado sólido [14].

Por simplicidad, partamos del caso unidimensional. Sea $n(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función periódica con periodo $a \in \mathbb{R}$ que describe alguna propiedad de un cristal en una dimensión, por ejemplo, su densidad de electrones. En una dimensión, a contiene la información sobre la red periódica del cristal, pues sólo existe una dimensión en la cual colocar los átomos que lo conforman. Podemos expresar a la función $n(x)$ como una serie de Fourier de senos y cosenos de modo que

$$n(x) = n_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \left[C_p \cos \left(\frac{2\pi p x}{a} \right) + S_p \sin \left(\frac{2\pi p x}{a} \right) \right], \quad (2.8)$$

donde $p \in \mathbb{Z}^+$ y $C_p, S_p \in \mathbb{R}$ son los coeficientes de Fourier de la expansión. La presencia del factor $2\pi/a$ en los argumentos de las funciones seno y coseno es la que captura la periodicidad original de la función $n(x)$, esto queda de manifiesto al realizar la siguiente expansión

$$\begin{aligned} n(x+a) &= n_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \left[C_p \cos \left(\frac{2\pi p(x+a)}{a} \right) + S_p \sin \left(\frac{2\pi p(x+a)}{a} \right) \right], \\ &= n_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \left[C_p \cos \left(\frac{2\pi p x}{a} + \frac{2\pi p a}{a} \right) + S_p \sin \left(\frac{2\pi p x}{a} + \frac{2\pi p a}{a} \right) \right], \\ &= n_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \left[C_p \cos \left(\frac{2\pi p x}{a} + 2\pi p \right) + S_p \sin \left(\frac{2\pi p x}{a} + 2\pi p \right) \right], \end{aligned}$$

pero, dada la periodicidad de las funciones seno y coseno cada 2π , tenemos que

$$\begin{aligned} &= n_0 + \sum_{p=1}^{\infty} \left[C_p \cos \left(\frac{2\pi p x}{a} \right) + S_p \sin \left(\frac{2\pi p x}{a} \right) \right] = n(x), \\ &\implies n(x+a) = n(x). \end{aligned}$$

Debido a esta propiedad del factor $2\pi/a$, al conjunto de todos sus múltiplos enteros (es decir, al conjunto de valores $2\pi p/a$ con $p \in \mathbb{Z}^+$) se les denomina la red recíproca del cristal, pues estos valores son los que reflejan la simetría traslacional en el espacio real al trabajar en el espacio de Fourier.

La serie de Fourier de la igualdad 2.8 puede ser expresada como una serie de exponenciales complejas, de modo que

$$n(x) = \sum_{p \in \mathbb{Z}} n_p \exp \left(i \frac{2\pi p x}{a} \right), \quad (2.9)$$

donde ahora los coeficientes de Fourier n_p son números complejos; nótese que al pasar a esta expresión, el número entero p ahora toma valores en $\mathbb{Z}$, en lugar de $\mathbb{Z}^+$. Si bien hemos pasado de una expresión para la función $n(x)$ como suma de senos y cosenos

con coeficientes reales (es decir, funciones de números reales a números reales) a una expresión de la misma función como exponenciales complejas con coeficientes complejos (esto es, funciones de números complejos a números complejos), la realidad física que describen ambas expresiones no ha cambiado; en este sentido, necesitamos imponer a la expresión 2.9 una condición adicional para garantizar que dicha serie nos genere una función real.

La condición requerida recae sobre los coeficientes de Fourier y se expresa de la siguiente manera

$$n_{-p}^* = n_p, \quad (2.10)$$

donde el asterisco como superíndice denota la operación de conjugar el número complejo (a grandes rasgos, cambiar el signo asociado a la parte imaginaria). Esta restricción es necesaria para asegurar que la suma de los términos asociados a los índices p y $-p$ sea real. Esta aseveración es fácil de comprobar, para ello sea $\phi = 2\pi px/a$ y recordemos que la exponencial compleja puede expresarse como $\exp(i\theta) = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$ para cualquier argumento $\theta \in \mathbb{R}$, de esta manera tenemos que

$$\begin{aligned} n_p \exp(i\phi) + n_{-p} \exp(-i\phi) &= n_p [\cos(\phi) + i \sin(\phi)] + n_{-p} [\cos(\phi) - i \sin(\phi)], \\ &= (n_p + n_{-p}) \cos(\phi) + i(n_p - n_{-p}) \sin(\phi), \end{aligned}$$

sustituyendo la restricción 2.10 tenemos que

$$= (n_p^* + n_{-p}) \cos(\phi) + i(n_p^* - n_{-p}) \sin(\phi),$$

expresando a $n_{-p} = a + ib$ con $a, b \in \mathbb{R}$, entonces $n_{-p}^* = a - ib$, con lo cual

$$\begin{aligned} &= [(a - ib) + (a + ib)] \cos(\phi) + i[(a - ib) - (a + ib)] \sin(\phi), \\ &= (2a) \cos(\phi) + i(-2ib) \sin(\phi) = 2a \cos(\phi) - 2i^2 b \sin(\phi), \end{aligned}$$

donde, recordando que $i^2 = -1$, tenemos que

$$\begin{aligned} &= 2a \cos(\phi) + 2b \sin(\phi), \\ \implies n_p \exp(i\phi) + n_{-p} \exp(-i\phi) &= 2a \cos(\phi) + 2b \sin(\phi), \end{aligned}$$

donde la expresión de la derecha es una función que va de los números reales a los números reales. De esta manera, la serie completa nos da una función real si solicitamos explícitamente que $n_0 \in \mathbb{R}$.

Bajo estas consideraciones, el caso tridimensional de una función periódica $n(\vec{x})$ se generaliza como

$$n(\vec{x}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{x}), \quad (2.11)$$

donde $\vec{G}$ es un elemento de un conjunto de vectores que capturan las simetrías traslacionales presentes en el cristal, es decir, los vectores que conforman a la red recíproca en tres dimensiones.

La red recíproca

Supongamos que el cristal que estamos analizando es tal que su estructura atómica posee simetrías traslacionales en las direcciones de los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \in \mathbb{R}^3$. Para construir a los vectores $\vec{G}$ requerimos de un conjunto de tres vectores $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3 \in \mathbb{R}^3$ (uno por cada simetría traslacional) tales que el producto punto de $\vec{a}_i$ con $\vec{b}_j$ sea igual a 2π si $i = j$ (por la periodicidad de las funciones seno y coseno) y cero si $i \neq j$, esto matemáticamente se expresa como

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (2.12)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker. Este conjunto de tres vectores $\vec{b}_i$, denominados los vectores primigenios de la red recíproca, quedan determinados a partir del conjunto de vectores $\vec{a}_i$ y la condición 2.12 de la siguiente manera

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}. \quad (2.13)$$

De esta manera, cualquier vector $\vec{G}$ estará expresado como una combinación lineal de los vectores $\vec{b}_i$, es decir

$$\vec{G} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3,$$

para algunos valores $m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$.

Comprobemos que, definidos de esta manera, la expansión como serie de Fourier de la función $n(\vec{x})$ mantiene la periodicidad requerida. Sea $\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$ con $u_1, u_2, u_3 \in \mathbb{Z}$ una traslación sobre los ejes de simetría traslacional del cristal, de esta manera tenemos que

$$n(\vec{x} + \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp\left(i\vec{G} \cdot (\vec{x} + \vec{T})\right) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{x}\right) \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right), \quad (2.14)$$

analizando por separado la segunda exponencial tenemos que

$$\begin{aligned} \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right) &= \exp\left(i(m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3) \cdot (u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3)\right) \\ &= \exp\left(i(m_1u_1\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_1 + m_2u_2\vec{b}_2 \cdot \vec{a}_2 + m_3u_3\vec{b}_3 \cdot \vec{a}_3)\right) \end{aligned}$$

donde el resto de los términos cruzados de la expansión del producto punto se vuelven cero por 2.12 al tener índices diferentes los vectores $\vec{b}_i$ y $\vec{a}_j$, tenemos entonces que

$$\begin{aligned} \exp\left(i\vec{G} \cdot \vec{T}\right) &= \exp\left(i(m_1u_1(2\pi\delta_{11}) + m_2u_2(2\pi\delta_{22}) + m_3u_3(2\pi\delta_{33}))\right) \\ &= \exp\left(2\pi i(m_1u_1 + m_2u_2 + m_3u_3)\right) = \exp\left(2\pi iu\right), \end{aligned}$$

con $u = m_1u_1 + m_2u_2 + m_3u_3 \in \mathbb{Z}$ por la cerradura de los números enteros. Pero, por la periodicidad de las funciones seno y coseno, tenemos que

$$\exp\left(2\pi iu\right) = \cos\left(2\pi u\right) + i\sin\left(2\pi u\right) = 1 + i0 = 1,$$

de modo que $\exp(i\vec{G} \cdot \vec{T}) = 1$. Sustituyendo en 2.14 tenemos que

$$n(\vec{x} + \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{x}) \exp(i\vec{G} \cdot \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \exp(i\vec{G} \cdot \vec{x}) = n(\vec{x}),$$

con lo que observamos la periodicidad de la función $n(\vec{x})$.

De esta manera, podemos concluir que todo cristal tiene asociadas dos redes: la red real (constituida por los sitios donde se localizan sus átomos) y la red recíproca (definida a partir de la red real a través de las ecuaciones 2.13), la cual existe en el espacio de Fourier.

Difracción de Laue

Finalmente, analicemos cómo se relaciona la red recíproca de un cristal con la difracción observada al hacerle incidir rayos X. Para este propósito, consideremos nuevamente que nuestro cristal está constituido por planos paralelos en los que se distribuyen sus átomos de manera periódica. Al incidir en él una onda electromagnética plana, una parte de esta onda se transmitirá dentro del cristal manteniendo su trayectoria inicial, mientras que otra parte será difractada al interactuar con los distintos planos que lo conforman. Esta difracción cambiará la dirección en la que se propaga la onda difractada con respecto a la dirección de propagación inicial, de modo que si la onda electromagnética poseía un vector de onda $\vec{k}_i$ antes de la difracción, posterior a esta tendrá un vector de onda $\vec{k}_f$. Contrario a lo que ocurría en el caso de una reflexión especular, para una difracción el ángulo que forma $\vec{k}_i$ con respecto al plano de difracción no es igual al ángulo que forma $\vec{k}_f$ con respecto a este mismo plano, véase la figura 2.8.

Procediendo de manera análoga al análisis realizado para la ley de Bragg, la diferencia entre las fases de dos ondas difractadas en dos planos diferentes separados por un vector de distancia $\vec{x}$ está dado por

$$\Delta\psi = (\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{x}.$$

Suponiendo que la amplitud de la onda difractada por un elemento de volumen dV del cristal es proporcional a la densidad local de electrones $n(\vec{x})$, entonces la amplitud total de todas las ondas difractadas al salir del cristal está determinada por la siguiente expresión

$$A_T = \int dV n(\vec{x}) \exp \left[i (\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{x} \right],$$

donde $\exp \left[i (\vec{k}_f - \vec{k}_i) \cdot \vec{x} \right]$ corresponde al desfase entre las ondas, pensando en la representación como exponencial compleja de una onda plana. Sustituyendo en la igualdad anterior a la función $n(\vec{x})$ por su serie de Fourier, tenemos que

$$A_T = \sum_{\vec{G}} \int dV n_{\vec{G}} \exp \left[i (\vec{G} - \Delta\vec{k}) \cdot \vec{x} \right], \quad (2.15)$$

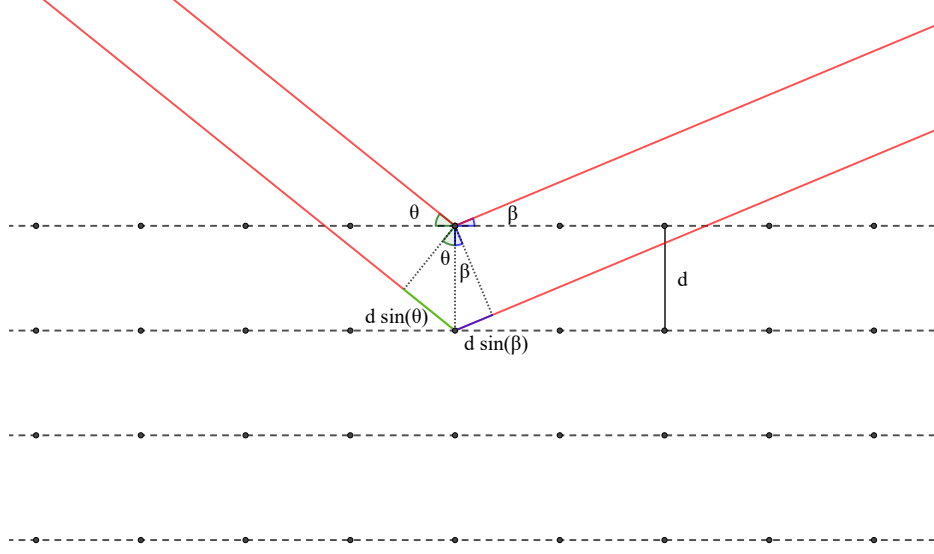


Figura 2.8: Visualización simplificada de la diferencia en el camino óptico recorrido por dos ondas electromagnéticas siendo difractadas por distintos planos de un cristal.

con $\Delta\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$. Observamos que cuando $\Delta\vec{k} = \vec{G}$, la exponencial compleja es igual a uno y tenemos que $A_T = \sum_{\vec{G}} V n_{\vec{G}}$, mientras que si $\Delta\vec{k}$ difiere significativamente de $\vec{G}$, el valor de A_T disminuye drásticamente. Para demostrar esta última aseveración, revisemos el caso de esta expresión en una dimensión (el caso tridimensional se sigue de aplicar este razonamiento a cada una de las tres dimensiones):

Supóngase una distribución espacial de los átomos tal que sus posiciones están dadas por $\rho_m = m\vec{a}$, con $m \in \mathbb{Z}$ y $\vec{a}$ uno de los ejes de simetría del cristal. En este caso, la función A_T se reduce a

$$A_T = \sum_k \sum_m n_k \exp \left[i \left(k\vec{a} - \Delta\vec{k} \right) \cdot m\vec{a} \right] = \sum_k \sum_m n_k \exp \left(ikm\vec{a} \cdot \vec{a} \right) \exp \left(-im\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right),$$

el término que nos interesa examinar es el correspondiente a $\exp \left(-im\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right)$, de modo que

$$A_T \propto \sum_m \exp \left(-im\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right) = \sum_m \left[\exp \left(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right) \right]^m,$$

asumiendo que existen M átomos en total y que nuestro sistema de referencia es tal que sus sitios corresponden a los valores desde $m = 0$ hasta $m = M - 1$, tenemos entonces que

$$A_T \propto \sum_m \left[\exp \left(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right) \right]^m = \frac{1 - \exp \left(-iM\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right)}{1 - \exp \left(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} \right)},$$

en donde se ha hecho uso del resultado

$$\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1 - x^M}{1 - x}.$$

Multiplicando por el complejo conjugado de esta expresión, tenemos que

$$\begin{aligned} |A_t|^2 &\propto \left(\frac{1 - \exp(-iM\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})}{1 - \exp(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})} \right) \left(\frac{1 - \exp(iM\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})}{1 - \exp(i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})} \right) \\ &= \frac{1 - \exp(-iM\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}) - \exp(iM\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}) + 1}{1 - \exp(-i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}) - \exp(i\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}) + 1} \\ &= \frac{2 - 2\cos(M\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})}{2 - 2\cos(\Delta\vec{k} \cdot \vec{a})}, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la igualdad

$$\cos(x) = \frac{\exp(ix) + \exp(-ix)}{2},$$

finalmente, empleando la identidad trigonométrica $\cos(2x) = 1 - 2\sin^2(x)$, tenemos que

$$|A_T|^2 \propto \frac{2 - 2 + 4\sin^2\left(\frac{M\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}}{2}\right)}{2 - 2 + 4\sin^2\left(\frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}}{2}\right)} = \frac{\sin^2\left(\frac{M\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{\Delta\vec{k} \cdot \vec{a}}{2}\right)}. \quad (2.16)$$

De la expresión 2.16 podemos obtener que los valores máximos de la intensidad de las ondas difractadas aparecerán cuando $\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} = 2\pi n$, con $n \in \mathbb{Z}$. Nosotros estamos interesados en calcular cuánto es lo más que podemos separarnos de esta igualdad antes de llegar a una intensidad igual a cero, es decir, estamos interesados en conocer el valor de ϵ tal que si $\Delta\vec{k} \cdot \vec{a} = 2\pi n + \epsilon$ tengamos el primer cero en la igualdad 2.16. En otras palabras, queremos resolver la siguiente ecuación para ϵ

$$\begin{aligned} \sin^2\left(\frac{M(2\pi n + \epsilon)}{2}\right) &= 0, \\ \implies \sin\left(\frac{M(2\pi n + \epsilon)}{2}\right) &= 0, \end{aligned}$$

expandiendo el seno de la suma de dos ángulos como $\sin(x + y) = \sin(x)\cos(y) + \sin(y)\cos(x)$ tenemos que

$$\implies \sin(M\pi n)\cos\left(\frac{M\epsilon}{2}\right) + \sin\left(\frac{M\epsilon}{2}\right)\cos(M\pi n) = 0,$$

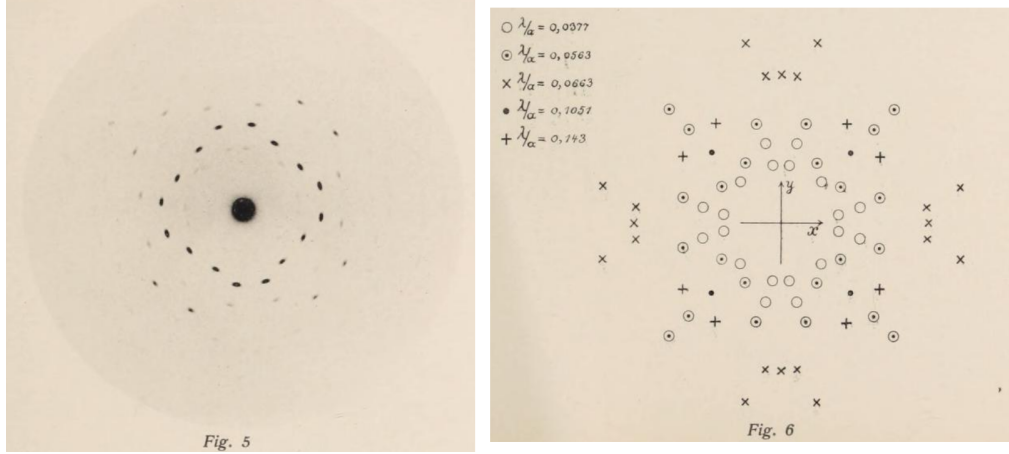


Figura 2.9: Ejemplo de un patrón de difracción obtenido por Friedrich y Knipping en sus experimentos sobre difracción de rayos X en cristales. Imagen recuperada de <https://archive.org/details/sitzungsberichte1912knig/page/n415/mode/2up>.

como $M, n \in \mathbb{Z}$, entonces $\sin(M\pi n) = 0$ y $\cos(M\pi n) = \pm 1$, de modo que

$$\implies \pm \sin\left(\frac{M\epsilon}{2}\right) = 0,$$

ecuación que se satisface si $M\epsilon/2 = \pi h$ con $h \in \mathbb{Z}$. Como estamos interesados en el primer cero, esto corresponde a tomar $h = 1$, de donde al despejar ϵ tenemos

$$\epsilon = \frac{2\pi}{M}.$$

El parámetro M está relacionado con el tamaño del cristal, de modo que para un cristal macroscópico (es decir, un valor de M muy grande) este ancho en la intensidad visible de las ondas difractadas será muy angosto.

De esta manera, concluimos que el patrón de difracción de los rayos X tras atravesar un cristal sólo será visible para aquellas ondas tales que el cambio en su vector de onda $\Delta \vec{k}$ coincida con alguno de los vectores de la red recíproca del cristal.

2.2.3. La consolidación de la cristalografía clásica

En la sección anterior analizamos a detalle la teoría detrás del experimento de la difracción de rayos X por una estructura cristalina, asumiendo como válida la hipótesis de que la distribución espacial de los átomos en un cristal está descrita por una función periódica. Con base en el análisis presentado, se puede inferir que el patrón de difracción observado al realizar el experimento estará compuesto por un conjunto de puntos discretos, a partir del cual es posible, haciendo uso de las relaciones 2.13, construir la red real del cristal, es decir la posición de sus átomos. En la figura 2.9 se puede observar uno de los patrones de difracción obtenidos por Friedrich y Knipping en 1912.

No es de sorprender que dichos resultados fueran galardonados con el Premio Nobel tan sólo un par de años después, ya que no sólo demuestran el comportamiento ondulatorio de los rayos X, sino que además proporcionan evidencia experimental de la existencia de los átomos, así como un método que permite sondear el interior de los sólidos para conocer su estructura atómica. Dotados de esta herramienta, la comunidad de cristalógrafos comenzaría a hacer uso de ella en una amplia variedad de sólidos, a fin de poder clasificarlos con respecto a alguno de los 230 grupos cristalográficos posibles. Muchos de los sólidos analizados generaban un patrón de difracción discreto, tal que al analizar la imagen obtenida, esta correspondía con alguna de las redes predichas por la teoría cristalográfica clásica; sin embargo, la gran mayoría de los sólidos presentaban un patrón de difracción difuso, compuesto por regiones de claros y oscuros en lugar de puntos bien definidos. A los sólidos cuyos patrones de difracción caían en este último caso se les denominó “amorfos” y se concluyó que su estructura interna no poseía ningún tipo de orden de largo alcance, similar a lo que ocurriría si sus átomos estuvieran en posiciones aleatorias.

Hasta este punto la cristalografía clásica parecía haber obtenido un rotundo éxito en su prueba final, pues para todos aquellos sólidos no amorfos, su estructura atómica formaba parte de alguno de los grupos cristalográficos predichos de manera teórica a partir del estudio de las isometrías espaciales, incluyendo en todos los casos la presencia de las isometrías traslacionales. No sería hasta finales del año 1984 que empezarían a resquebrajarse los cimientos de lo que aparentemente era una teoría a prueba de fallos.

3 Cuasicristales

En el capítulo anterior revisamos los fundamentos de la cristalografía clásica, partiendo del concepto de isometría traslacional como piedra angular en el desarrollo de la teoría matemática encargada de estudiar las teselaciones del plano y el espacio, mismas que servirían como modelo para la estructura interna de los cristales. Con el descubrimiento de los rayos X y su posterior aplicación al análisis estructural de los sólidos, se desarrolló una técnica experimental capaz de comprobar si las hipótesis empleadas en el estudio teórico de los cristales eran ciertas, encontrando que la gran mayoría de los sólidos no poseen una estructura ordenada sino más bien aleatoria, pero validando a su vez que, para aquellos casos en los que la estructura interna de los sólidos sí posee un orden, esta se corresponde con alguna de las 230 estructuras permitidas por la cristalografía.

En el presente capítulo revisaremos los eventos teóricos y experimentales que tuvieron lugar en la década de 1980, a partir de los cuales resultaría evidente la necesidad de generalizar la teoría cristalográfica para conciliarla con la existencia de un nuevo tipo de sólidos cuya estructura interna estaba explícitamente prohibida por esta: los cuasicristales. Abordaremos de igual forma algunos de los algoritmos desarrollados para generar las denominadas estructuras cuasiperiódicas que los describen, finalizando con un breve recuento sobre algunas de sus aplicaciones potenciales y áreas de estudio en las que aparecen. Como aclaración necesaria, gran parte del contenido presente en las secciones 3.3, 3.4 y 3.5 se publicó inicialmente en mis tesis de licenciatura y maestría [15, 16], integrándose en el presente documento por temas de completez, procurando en medida de lo posible aumentar o profundizar en el contenido aquí replicado.

3.1. Descubriendo un material imposible

Tras los resultados obtenidos por la difracción de rayos X en el estudio de la estructura atómica de los cristales, cualquier duda sobre la validez de la hipótesis cristalográfica respecto a la periodicidad de su distribución atómica quedó disipada, motivo por el que gran parte de las investigaciones en esta área fueron enfocadas hacia el estudio y clasificación de los diferentes materiales, con nulas expectativas de encontrar algún sólido ajeno a los cristales periódicos o, en su defecto, a los sólidos amorfos.

De esta índole fue la tarea encomendada al científico israelí Dan Shechtman en

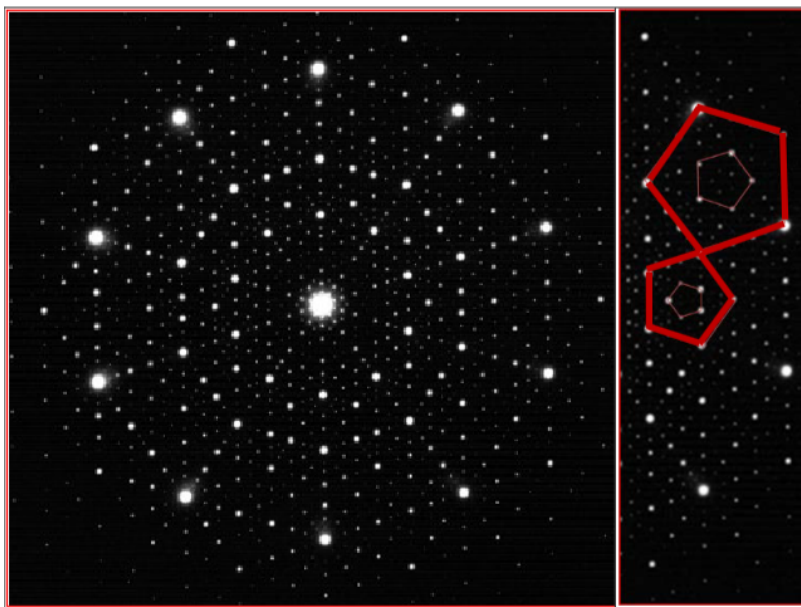


Figura 3.1: Patrón de difracción con simetría decagonal observado en una muestra de Al_6Mn , material que posee una simetría icosaédrica. Nótese la presencia de pentágonos perfectos dentro del patrón de difracción como se resalta en el diagrama de la derecha. Imagen recuperada de [13].

los años de 1982 a 1984, quien por invitación del científico estadounidense John Cahn (reconocido investigador por su trabajo acerca de los procesos que ocurren a nivel atómico cuando los metales líquidos son enfriados hasta su solidificación), formaría parte de un proyecto de investigación financiado por la Fundación Nacional de Ciencias y la Agencia de Proyectos de Investigación Avanzados de Defensa, cuyo objetivo consistía en sintetizar y clasificar la mayor cantidad de aleaciones de aluminio producidas al enfriar rápidamente mezclas líquidas de este metal con otros elementos. Dentro del equipo de científicos involucrados en el proyecto, serían Robert Schaefer y Frank Biancaniello quienes sintetizarían diversas aleaciones de aluminio con manganeso (variando el porcentaje presente de este último elemento) motivados por la resistencia superior que suelen presentar dichas aleaciones comparadas con el resultado obtenido al emplear únicamente aluminio [17].

En la mañana del 8 de abril de 1982, al estudiar una aleación de Al_6Mn (es decir, una aleación con seis átomos de aluminio por cada átomo de manganeso), Shechtman registró la observación de un patrón de difracción que no debería existir: un conjunto de puntos discretos perfectamente definidos, propios de un cristal, pero con una simetría rotacional decagonal [18]. Véase la figura 3.1.

Ante el increíble resultado experimental que acababa de presenciar, Shechtman realizó algunas pruebas adicionales para descartar posibles explicaciones menos drásticas que aceptar la existencia de una estructura cristalina prohibida, en particular corroboró que la muestra que acababa de analizar no resultara ser una macla de algún tipo (por ejemplo, una macla de penetración, la cual aparece cuando dos o más cristales interpenetran entre sí), pues era un hecho bien conocido el que este caso particular

de cristales puede producir patrones de difracción extraños, particularmente un patrón de difracción pentagonal. Tras descartar cualquier otra explicación y habiendo verificado sus experimentos, concluyó que la aleación de Al_6Mn que había analizado se trataba en realidad de una estructura cristalina icosaédrica (es decir, con una simetría igual a la de un poliedro regular de veinte caras), una estructura que no está contemplada dentro de las 230 estructuras que permite la teoría cristalográfica clásica. La comunicación y defensa de este resultado le valió una gran cantidad de burlas y comentarios que buscaban ridiculizarlo, llegando incluso a ser expulsado de su grupo de investigación [19]. Años más tarde la figura de Dan Shechtman sería redimida al ser galardonado en el 2011 con el Premio Nobel en Química por el descubrimiento de este nuevo tipo de cristales [20].

3.2. Modelando un nuevo estado de la materia

El descubrimiento de un cristal con una simetría icosaédrica generó un fuerte debate y discusión en la comunidad científica, la cual estaba renuente a aceptar que los cimientos de la cristalografía fuesen falsos o, en el mejor de los casos, que estuviesen incompletos. Si la evidencia experimental demostraba que las isometrías traslacionales no son las que definen a un cristal entonces ¿dónde es que reside la esencia de los sólidos cristalinos? Para responder a esta pregunta necesitamos antes describir y modelar a estos nuevos cristales no periódicos desde un enfoque teórico/matemático, labor que sería desarrollada por los físicos estadounidenses Paul Steinhardt y Dov Levine, quienes desde 1981 comenzaron a estudiar la posibilidad de que un sólido tridimensional pudiera construirse generando una estructura atómica icosaédrica.

La motivación detrás de esta idea vendría de los resultados obtenidos al simular computacionalmente el comportamiento de los átomos en un líquido cuando este es rápidamente enfriado hasta su solidificación. En un proceso de enfriamiento lento, los átomos de un sistema líquido tienden a reconfigurarse desde un estado completamente aleatorio a un estado ordenado y periódico, sin embargo, este proceso no es espontáneo y requiere una ventana temporal para llevarse a cabo por lo que surgen las siguientes preguntas: ¿Qué ocurre con la distribución espacial de los átomos si no le damos el tiempo suficiente a estos de ordenarse por completo? ¿Llegaremos a un sólido amorfo, carente de cualquier indicio de orden, como si se tratara de una fotografía instantánea de su estado líquido? ¿O quizás el sólido amorfo al que lleguemos tendrá en su estructura algún tipo de orden subyacente? Entre las conjeturas de lo que pudiera ocurrir en este último caso destaca la realizada por David Nelson y su estudiante John Toner, quienes sostenían que la distribución espacial de los átomos sería completamente aleatoria, pero que los enlaces entre ellos estarían alineados de tal forma que, en promedio, describirían una red cúbica [17].

Para 1980, Steinhardt, Nelson y Marco Ronchetti habían llevado a cabo estas simulaciones sin encontrar indicios contundentes de una estructura cúbica en la alineación de los enlaces atómicos, obteniendo en su lugar una posible estructura icosaédrica [21]. Estos resultados serían expuestos por Steinhardt a finales de 1981 en un coloquio de la Universidad de Pensilvania como un resultado curioso más que como una realidad

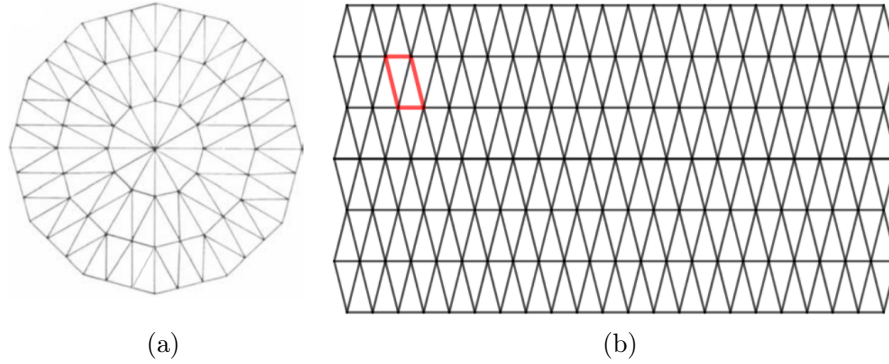


Figura 3.2: (a) Teselado aperiódico construido a partir del uso de triángulos isósceles como teselas. (b) Teselado periódico construido a partir del mismo conjunto de teselas del caso anterior. Imagen recuperada de [16]

física, pese a ello, Levine emprendería la búsqueda de un modelo atómico compatible con dichos resultados como su proyecto de investigación doctoral bajo la tutela de Steinhardt. Aún y con todo el entusiasmo inicial al abordar el tema, la tarea era en absoluto sencilla pues se buscaba una manera de cubrir el espacio de modo que se generara una simetría rotacional icosaédrica prescindiendo del uso de cualquier isometría traslacional, es decir, un algoritmo para generar un teselado aperiódico en concreto. Afortunadamente para ambos el problema no era del todo inexplorado, siendo Roger Penrose (físico matemático británico, ganador del Premio Nobel en Física en el 2020 por su trabajo sobre la formación de agujeros negros [22]) el autor de una solución bastante elegante para construir un teselado similar en dos dimensiones [23].

3.2.1. Teselados aperiódicos

Un teselado aperiódico es aquella manera de cubrir un plano (o espacio) a partir de un conjunto finito de teselas distintas sin dejar huecos ni superponer una tesela con otra, añadiendo además la restricción de prescindir de cualquier simetría traslacional en el teselado. Generar teselados aperiódicos no es complicado y existen varios ejemplos de sistemas que satisfacen estas condiciones, véase por ejemplo la figura 3.2 (a). El detalle con los teselados aperiódicos de este tipo es que, reordenando la configuración espacial de las teselas, es posible generar también un teselado periódico, véase la figura 3.2 (b). Considerando esta característica, la pregunta que surge es la siguiente: ¿Existe algún conjunto de teselas con las cuales sólo se pueda construir un teselado aperiódico? La condición de construir únicamente un teselado aperiódico implica que, a partir de cualquier subconjunto (incluyendo el conjunto completo) de dichas teselas, no es posible formar un teselado periódico. A un conjunto con estas características, en caso de existir, se le denominó un conjunto aperiódico de teselas.

La búsqueda de una respuesta a esta pregunta se remonta hasta los años sesenta, cuando el lógico chino Hao Wang presentó su investigación sobre la decidibilidad del “problema del teselado” en la búsqueda de un programa de computadora que fuera

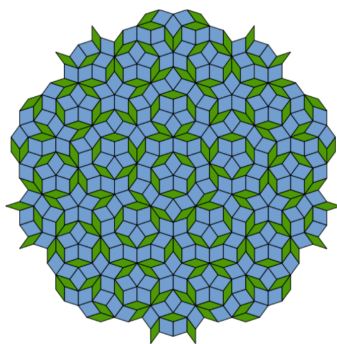


Figura 3.3: Vecindad local del teselado de Penrose. Señaladas por colores se distinguen las dos teselas distintas que lo conforman. Imagen recuperada de https://es.wikipedia.org/wiki/Teselaci3n_de_Penrose

capaz de realizar demostraciones matemáticas [24]. Wang concluyó que el problema es decidible si se niega la existencia de los conjuntos aperiódicos de teselas, conjeturando a su vez que estos conjuntos son imposibles de construir. Fue en 1966 que su estudiante Robert Berger demostró que dicho problema es en realidad indecidible, mostrando a su vez un conjunto de 20,426 teselas diferentes que sólo pueden teselar el plano de forma aperiódica [25]. Tras la publicación del resultado de Berger, la comunidad matemática comenzó a buscar conjuntos aperiódicos de teselas con una menor cantidad de elementos, siendo uno de los más conocidos el conjunto encontrado por Penrose en 1974, estando este conformado por únicamente dos teselas distintas [23]. Actualmente, al teselado que se genera con dicho conjunto se le conoce como el teselado de Penrose, véase la figura 3.3.

En su publicación original, Penrose no brinda demasiados detalles acerca de las propiedades matemáticas que posee su teselado, centrándose principalmente en mostrar la naturaleza aperiódica de este y proporcionando las reglas de emparejamiento que deben satisfacer cualesquiera dos teselas adyacentes para que el sistema pueda crecer de manera arbitraria. Sin el uso de estas reglas es posible ir colocando una tesela junto a otra sin dejar huecos ni superponerlas, pero eventualmente se llegará a una configuración que no permite colocar alguna nueva tesela; como dato curioso, es justamente la existencia de estas reglas las que motivaron a Penrose a pensar en su teselado como un rompecabezas que pudiera ser comercializado. Vale la pena mencionar en este punto que el teselado de Penrose es un teselado en toda regla, carente de simetría traslacional, pero con un orden perfectamente definido el cual da lugar a una simetría pentagonal, simetría que como mencionamos en la sección 2.1.2 es imposible de conseguir a partir del uso de isometrías traslacionales.

Tomando al teselado de Penrose como punto de partida para continuar su investigación desde una nueva perspectiva, Levine y Steinhardt publicarían hacia finales de 1984 su teoría sobre los cuasicristales, denominación que le dieron a los sistemas cristalinos cuya estructura atómica posee un orden traslacional cuasiperiódico en lugar de un orden traslacional periódico, característica que le permite a estos sistemas poseer una variedad infinita de simetrías rotacionales [26], siendo este nuevo tipo de estructuras compatibles con la existencia de cristales como el descubierto por Shecht-

man [27].

Como veremos más adelante en la sección 3.4, en la actualidad se conocen algoritmos para construir conjuntos aperiódicos de teselas en cualquier espacio de dimensión M arbitraria (por ejemplo $M = 1$, siendo el teselado o cadena de Fibonacci el más conocido de los casos unidimensionales [28]), con cualquier cantidad de teselas diferentes (incluyendo aquellos que están conformados por únicamente una tesela, como el presentado por Smith, Myers, Kaplan y Goodman-Strauss en 2023 [29]) y con cualquier simetría rotacional (incluyendo aquellas compatibles con teselados periódicos, por ejemplo el conjunto presentado por Paredes, Aragón y Barrio en 1998, el cual posee una simetría hexagonal [30]).

3.3. Orden, periodicidad y cuasiperiodicidad

A lo largo del presente capítulo hemos mencionado en repetidas ocasiones el concepto de “orden” como característica fundamental que separa a los cristales de los sólidos amorfos, pero no nos hemos detenido a definirlo ni precisar detalles sobre él. El orden es uno de estos conceptos que todos podemos identificar relativamente fácil cuando lo vemos, pero que definirlo formalmente no resulta tan sencillo. De manera muy general podemos pensar en él como aquella propiedad presente en algunos entes/conjuntos/sistemas/fenómenos que permite predecirlos en cuanto a su comportamiento futuro o disposición espacial global a partir de su comportamiento actual o disposición espacial local, debido a la existencia de reglas bien definidas entre sus componentes que permiten identificar patrones en ellos. Esta característica de predictibilidad hace que muchos de los ejemplos que se nos vienen a la mente al pensar en fenómenos naturales ordenados sean del tipo periódico pues ¿qué puede ser más predecible que aquello que se repite a sí mismo cada cierto tiempo o distancia?

La asociación de lo periódico como sinónimo de orden no es reciente, desde muy temprano en la historia de la humanidad hemos aprendido como especie a dotar de orden y estructura al mundo que nos rodea, identificando patrones en nuestro entorno natural como medio de supervivencia, destacando entre ellos el ciclo del día y la noche, las fases lunares o las estaciones del año, los cuales desempeñaban un papel esencial para la caza, la recolección y la agricultura. Idealmente estos ciclos satisfacen una periodicidad temporal tal que, cada cierto tiempo t medido a partir de cualquier instante t_0 , el estado observado del sistema (por ejemplo, la posición del sol en el cielo o el porcentaje iluminado de la luna) es indistinguible entre los tiempos t_0 y $t_0 + t$.

Matemáticamente y para el caso unidimensional, definimos a las funciones periódicas de la siguiente manera:

Definición 3.3.1. Sea $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función definida en $X \subset \mathbb{R}$. Decimos que la función f es periódica con un periodo $T \neq 0$ si para cada $x \in X$ los números $x - T$ y $x + T$ también pertenecen al conjunto X , cumpliendo además la igualdad $f(x \pm T) = f(x)$ [31].

Esta definición es sumamente estricta puesto que no da margen de error a ligeras

variaciones entre los valores que toma la función cada periodo T , en este sentido ninguno de los ejemplos mencionados anteriormente puede ser catalogado como un fenómeno periódico, pues todos ellos presentan pequeñas irregularidades en el tiempo ¿Esto significa entonces que dichos ciclos resultan inservibles para dotar de orden al mundo en que vivimos? Ciertamente no, pues aunque existan variaciones en la hora a la que amanece cada día (en función de la posición relativa de la Tierra al Sol a lo largo de su órbita) dichas variaciones son pequeñas, por lo que podemos aspirar a que existan algunos valores $\tau \in \mathbb{R}$ para los que la igualdad presente en la definición de las funciones periódicas se satisfaga aproximadamente con un grado arbitrario de precisión. A las funciones que satisfacen esta propiedad se les denomina funciones casiperiódicas (o “almost periodic functions” en inglés), las cuales fueron estudiadas por el matemático danés Harald Bohr quien creó y desarrolló la teoría matemática para dichas funciones entre los años 1923 y 1925 [32].

Para precisar matemáticamente el comportamiento de estas funciones pensemos en una función $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, que si bien no sea periódica, sí cumpla la condición de que la diferencia entre $F(x)$ y $F(x \pm \tau)$ sea pequeña para algún valor de $\tau \in \mathbb{R}$, es decir, que los valores $F(x)$ y $F(x \pm \tau)$ sean casi iguales. El qué tan pequeña es la diferencia que vamos a tolerar entre $F(x)$ y $F(x \pm \tau)$ lo denotamos como ϵ y es justamente esta cantidad la que va a determinar el valor de τ a emplear, en ese sentido τ es una función de ϵ . Acercándonos un poco más a la definición formal de este conjunto de funciones, definamos formalmente la relación entre τ y ϵ :

Definición 3.3.2. Sea $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua. Llamamos a $\tau = \tau(\epsilon) \in \mathbb{R}$ un número de traslación o casiperiodo de F asociado a un valor $\epsilon > 0$ si satisface que $|F(x \pm \tau) - F(x)| \leq \epsilon$, $\forall x \in \mathbb{R}$.

La definición anterior contiene prácticamente a la definición formal de una función casiperiódica, salvo por el hecho de que si ϵ no es lo suficientemente pequeña, entonces el correspondiente valor de τ podría aumentar mucho, situaciones que buscamos dejar fuera de nuestra definición. Para ello requerimos agregar una condición adicional:

Definición 3.3.3. Sea $A \subset \mathbb{R}$ un subconjunto de los números reales, decimos que A es relativamente denso en $\mathbb{R}$ si existe un número $l > 0$ tal que cualquier intervalo de longitud l contiene al menos un número de A .

Empleando estas dos definiciones previas, definimos a las funciones casiperiódicas como:

Definición 3.3.4. Una función continua $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es llamada casiperiódica, si el conjunto de todos los números de traslación de F correspondientes a los diferentes valores de ϵ , $\{\tau(\epsilon)\}$, es relativamente denso en $\mathbb{R}$.

En otras palabras, una función continua F es casiperiódica si dado algún $\epsilon > 0$, existe $l = l(\epsilon) > 0$ tal que cualquier intervalo de longitud l contiene al menos un número de traslación τ asociado a dicho ϵ [32].

Relacionado con este conjunto de funciones tenemos a las funciones cuasiperiódicas, las cuales encuentran su definición como una “generalización” al concepto de las

funciones casiperiódicas. Tal y como tuvimos oportunidad de revisar brevemente en la sección 2.2.2, toda función continua puede ser expresada como una serie infinita de funciones armónicas con periodos distintos (las funciones senos y cosenos, principalmente). Cuando la función de interés se obtiene a partir de una suma finita, el resultado puede ser periódico o casiperiódico. Generalizando esta idea de funciones casiperiódicas obtenidas a través de sumas finitas de funciones periódicas (no necesariamente armónicas) para las cuales los periodos de todas ellas son inconmensurables entre sí, construimos una nueva categoría de funciones, a las cuales denominamos funciones cuasiperiódicas (“quasiperiodic functions” en inglés). De manera formal, su definición sería la siguiente:

Definición 3.3.5. Una función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es cuasiperiódica si satisface que $f(t) = F(t, t, \dots, t)$ para alguna función continua $F(t_1, t_2, \dots, t_n)$ de n variables reales que es periódica con respecto a $t_1, t_2, \dots, t_n$ con periodos $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ respectivamente. Todos los periodos $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ deben ser estrictamente positivos e inconmensurables entre sí.

Una definición equivalente se puede encontrar en [33].

3.4. Métodos de construcción

Así como los cristales clásicos toman como modelo matemático para su descripción a las redes periódicas, los cuasicristales son modelados a través de teselados cuasiperiódicos (siendo el teselado de Penrose un ejemplo de ellos), de modo que los vértices de las teselas se corresponden con los sitios en los que se localizan los átomos de su estructura interna (es en este sentido que al comienzo del capítulo 2 adelantábamos que los cuasicristales pueden pensarse como un tipo muy particular de mosaicos). Generar estos teselados no es tarea trivial, aunque en la actualidad existen múltiples algoritmos para dicho propósito, entre los que destacan el método de inflación/deflación, el método dual generalizado y el método de corte y proyección.

Los sistemas cuasiperiódicos empleados en las simulaciones y cálculos del presente proyecto de investigación han sido generados a partir de un algoritmo basado en el método dual generalizado (cuyos detalles se presentan en la sección 4), sin embargo, para el análisis de algunos de los resultados obtenidos es necesario pensar en estos sistemas como producto de haber aplicado el método de corte y proyección, motivo por el cual en esta sección revisaremos algunas de sus generalidades. Cabe señalar que este salto entre ambos métodos de construcción está justificado por el hecho de que el método dual generalizado y el método de corte y proyección son equivalentes bajo ciertas condiciones [34] (hablaremos un poco más sobre estas condiciones en la sección 4.3), siendo el primero un método algebraico que describe, a partir de una combinación lineal de vectores, los vértices de las teselas que se obtienen por el segundo método a partir de una proyección ortogonal de un espacio de dimensión M a un subespacio de dimensión $K < M$, con $K, M \in \mathbb{Z}^+$.

3.4.1. Método de corte y proyección

Para el alcance de la presente tesis bastará con mencionar la idea general que sirve de base al método de corte y proyección sin entrar en sus detalles matemáticos, el lector interesado en ahondar en estos detalles puede consultar la referencia [35]; una versión en español puede ser consultada en mi tesis de licenciatura [15], cuyos siguientes párrafos son una transcripción de la introducción al método de corte y proyección ahí expuesta:

De acuerdo a la definición 3.3.5 de función cuasiperiódica, podemos pensar en ellas como el resultado de “reducir” una función de múltiples variables (periódica en cada una de ellas con periodos inconmensurables entre sí) a una función de sólo una variable. Esta idea nos motiva a pensar que para generar redes cuasiperiódicas en dos dimensiones podemos definir una red periódica en dimensiones mayores a dos y posteriormente proyectarla de alguna manera a un subespacio bidimensional.

Para el caso más sencillo posible (correspondiente a generar una red cuasiperiódica unidimensional a partir de la proyección de una red periódica bidimensional) consideremos una red bidimensional cuadrada y una partícula desplazándose en línea recta sobre el plano que la contiene. Debido a que la separación de los puntos que conforman a la red cuadrada es igual en ambos ejes coordenados, la periodicidad del movimiento de la partícula sobre el plano recae únicamente en las proyecciones de la velocidad sobre dichos ejes. De esta manera, si las proyecciones de la velocidad son inconmensurables entre sí, es decir que la pendiente de la recta que describe la trayectoria de la partícula es irracional, podemos pensar en el movimiento que describe la partícula con respecto al vértice más cercano en la red como la suma de dos movimientos periódicos con periodos inconmensurables entre sí, es decir, una función cuasiperiódica.

Notemos que hasta ahora esto nos generará una función cuasiperiódica continua, sin embargo, nosotros estamos interesados en generar una función cuasiperiódica discreta que describa los sitios de una red. A partir de la función cuasiperiódica continua podemos seleccionar al subconjunto de puntos correspondientes a los mínimos locales de la función, este conjunto corresponderá a los vértices de nuestra red cuasiperiódica unidimensional, siendo a su vez equivalente a considerar la proyección de los vértices más cercanos a la línea que describe la partícula al desplazarse.

Este método de selección de los vértices de la red periódica que proyectaremos a la trayectoria de la partícula es equivalente a considerar a los vértices que conforman a los centros de los polígonos de Voronoi formados a partir de la red periódica bidimensional por los cuales pasa la trayectoria de la partícula. Esto a su vez es equivalente [36] a considerar aquellos vértices de la red periódica que caen dentro de una banda formada por el producto cartesiano de la trayectoria y la proyección de un cuadrado de lado uno centrado en el origen sobre el espacio ortogonal a la trayectoria de la partícula, véase la figura 3.4.

Podríamos no sólo haber tomado la proyección de los vértices más cercanos, sino también considerar a los segundos vértices más cercanos o incluso generalizar esta línea de pensamiento a todos aquellos vértices que se encuentren dentro de alguna banda formada por el producto cruz de la trayectoria y cualquier otra figura en el

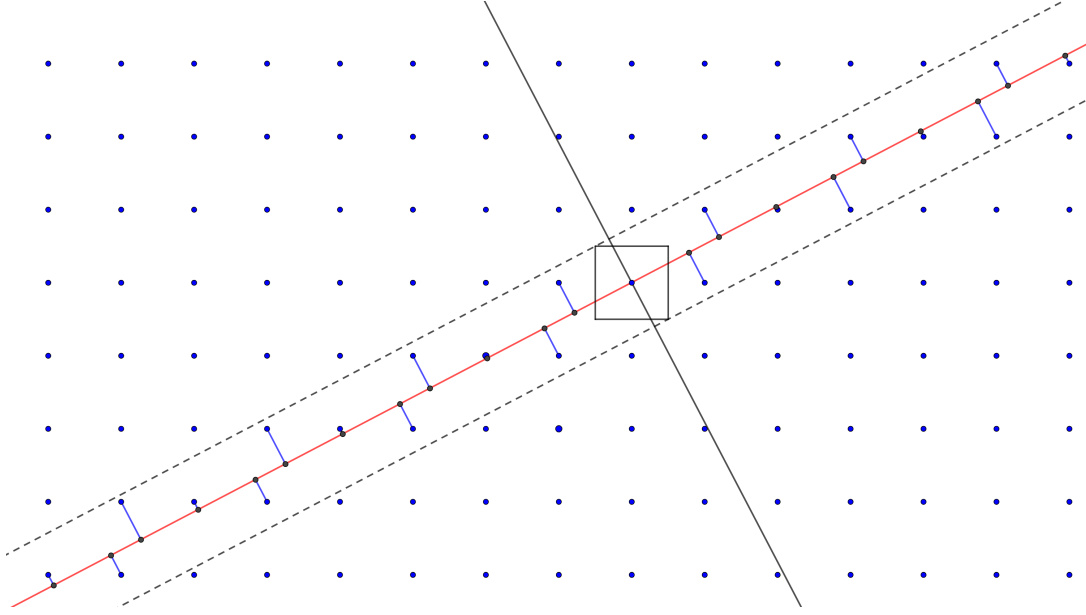


Figura 3.4: Ejemplo de la banda de aceptación requerida para realizar la proyección de una red cuadrada periódica en dos dimensiones a un subespacio unidimensional con pendiente irracional. La trayectoria de la partícula está señalada por una recta en color rojo, mientras que la banda de aceptación está señalada por dos rectas discontinúas en color negro.

espacio ortogonal a dicha trayectoria.

Este algoritmo descrito para el caso de sistemas cuasiperiódicos unidimensionales puede ser extrapolado al caso de dimensiones mayores, en particular sistemas bidimensionales como resultado de la proyección de redes periódicas de dimensión $M > 2$.

3.5. Estado del arte

Tras los artículos de Shechtman, Levine y Steinhardt, el número de publicaciones reportando diferentes variedades de cuasicristales fue en aumento [37–41], motivo por el cual la Unión Internacional de Cristalografía (IUC por sus siglas en inglés) modificó en 1991 la definición de cristal, quedando de la siguiente manera [42]:

Definición 3.5.1. A partir de ahora, entenderemos por cristal cualquier sólido cuyo patrón de difracción sea discreto, siendo un cristal aperiódico [entre ellos los cuasicristales] cualquier cristal cuya red tres dimensional carezca de periodicidad.

Nótese que, bajo esta definición, los cuasicristales son casos particulares de los cristales.

En la actualidad los sistemas cuasiperiódicos no se limitan a la descripción de la estructura atómica de los cuasicristales sintetizados en laboratorio a partir de aleaciones metálicas, sino que han sido tema central en diversas áreas, destacando la óptica y la materia condensada blanda. En la presente sección mencionaremos algunas de las publicaciones que hemos considerado más relevantes en dichas áreas y sus principales resultados.

3.5.1. Cuasicristales suaves

En el 2004 Zeng et al. [43] reportaron la presencia de una estructura con simetría rotacional dodecagonal ($N = 12$) en uno de sus planos (presentando una estructura periódica con respecto al eje ortogonal a este plano) al estudiar el compuesto $12G_3CH_2OH$, el cual es un sistema conformado por dendrones (moléculas en forma de árbol) al que catalogaron como un cuasicristal líquido (sistemas que muestran un orden cuasiperiódico en la disposición espacial de sus componentes, manteniendo al mismo tiempo cierta fluidez o flexibilidad dinámica, presentando características propias de los líquidos como viscosidad y adaptabilidad a contenedores). Este ejemplo forma parte de los denominados “cuasicristales suaves”, estructuras cuasiperiódicas presentes en los sistemas que son objeto de estudio de la materia condensada blanda (o “soft matter” por su término en inglés) tales como líquidos, coloides, espumas, geles, etc. Una de las características interesantes sobre los cuasicristales suaves es la escala de longitud que presentan sus estructuras cuasiperiódicas. La longitud de las celdas unitarias de las estructuras cuasiperiódicas asociadas a los cuasicristales formados por aleaciones metálicas es del orden de 0.5 nm, siendo del orden de 2 nm para calcogenoides, 10 nm para cuasicristales líquidos formados por supramoléculas dendrímeras (con forma de árbol) así como para sílices mesoporosas, 20 nm para nanopartículas binarias, 50 nm para coloides y entre 50 y 80 nm para polímeros lineales [44].

Varias de las estructuras cuasiperiódicas que pueden producirse en los sistemas coloidales son gracias al uso de trampas ópticas. En el 2005 Roichman y Grier [45] reportaron el uso de trampas ópticas holográficas para obtener cuasicristales coloidales de microesferas de silicio de $1.53 \mu m$ de diámetro dispersas en una solución acuosa a partir de la proyección a dos dimensiones de patrones cuasiperiódicos en tres dimensiones (en particular reportan la proyección de una red cuasiperiódica icosaédrica); esto con el propósito de proponer un método experimental para estudiar la dinámica de los cuasicristales coloidales. En el 2008 Mikhael et al. [46] realizaron estudios experimentales sobre el comportamiento de fase de monocapas de sistemas coloidales al interactuar con un sustrato decagonal cuasicristalino creado por la interferencia de cinco rayos láser. Entre sus conclusiones de los experimentos presentados resalta la sugerencia de añadir cambios en las fases de los rayos láser que interfieren para generar la estructura cuasiperiódica con el objetivo de estudiar los modos fasónicos y fonónicos. En el 2010, Mikhael et al. [3] publicaron un artículo referente a algunas constricciones geométricas que impiden la formación de cuasicristales coloidales para ciertas simetrías rotacionales generados a partir de la interferencia de rayos láser. En el 2011, Fischer et al. [47] reportaron la (auto)formación de estructuras cuasiperiódicas con simetrías rotacionales dodecagonal ($N = 12$) y octodecagonal ($N = 18$) en coloides cuya fase continua fue agua y cuya fase dispersa consistió en poli(óxido de isopreno-*b*-etileno), $PI_n - PEO_m$, con n y m los diferentes grados de polimerización de los polímeros; dichas estructuras se observaron para los casos particulares $PI_{30} - PEO_{120}$, $PI_{30} - PEO_{124}$ y $PI_{32} - PEO_{120}$ a diferentes temperaturas y concentraciones. Este fue el primer caso en el que se observó una estructura cuasiperiódica octodecagonal. A finales del 2012, Schmiedeberg y Stark [5] publicaron un artículo en el que exploran las posibles causas detrás del por qué sólo unas cuantas simetrías

rotacionales se han logrado observar de manera experimental. Para ello han realizado simulaciones computacionales de cuasicristales coloidales a partir de métodos de Monte Carlo y concluyeron que para los casos comúnmente observados (cuasicristales con simetría rotacional $N = 5, 8, 10$ y 12) las intensidades de los láseres que interfieren para construir el sistema cuasiperiódico son relativamente bajas comparadas a aquellas simetrías rotacionales que no se suelen observar. En el 2014, Martinsons et al. [48] estudiaron las trayectorias de partículas dentro de cuasicristales coloidales de simetría rotacional $N = 14$ (rango $\phi(N) = 6$) para analizar la dependencia de los flips fasónicos en ellas, observando diferencias en su comportamiento con respecto al caso en el que el rango del sistema es 4.

En años más recientes se siguen estudiando diversos aspectos sobre los cuasicristales suaves, entre los que destacan un análisis sobre su estabilidad termodinámica [49], nuevos modelos computacionales para simular el crecimiento de cuasicristales bidimensionales tanto en coloides [50] como en estructuras moleculares [51] o simulaciones empleando métodos de Monte Carlo para estudiar, a partir de un potencial de Lennard-Jones-Gauss con dos mínimos locales, la transición de líquido a sólido en cuasicristales bidimensionales con simetría decagonal ($N = 10$) en coloides [52].

3.5.2. Cuasicristales fotónicos

Los cuasicristales fotónicos son un tipo de materiales ópticos los cuales forman parte de los denominados “materiales con brecha de banda fotónica”, caracterizados por prohibir la propagación de la luz para ciertos intervalos de frecuencia, en una o más direcciones [53–56]. Los detalles técnicos acerca de la existencia de estas brechas fotónicas en sistemas cuasiperiódicos pueden encontrarse en los artículos [53, 57].

A principios del 2020, Jin et al. [58] describieron un método experimental para generar cuasicristales fotónicos de simetría octogonal en dos dimensiones. El método por interferencia de láseres empleado por los autores se basa en el efecto fotorefractivo presente en algunos materiales, el cual se manifiesta como una variación del índice de refracción del material a causa de una fuente luminosa que incide sobre él. De esta manera, al emplear múltiples láseres coherentes se pueden formar patrones periódicos o cuasiperiódicos en el índice de refracción de un material fotorefractivo, dando lugar a un cuasicristal fotónico.

De manera complementaria al caso cuasiperiódico, es de interés el trabajo de Rousseau y Felbacq [59], quienes en el 2007 estudiaron la propagación de la luz en cristales (periódicos) fotónicos bajo un modelo de gas de Lorentz para el caso en el que la longitud de onda es mucho menor (al menos en un orden de magnitud) que el tamaño de los componentes que conforman al cristal. Entre sus principales resultados se encuentra la presencia de trayectorias caóticas para los rayos de luz en el límite de altas frecuencias, aunque su relevancia para nuestro proyecto de investigación recae en el modelo propuesto para estudiar estos sistemas.

3.5.3. Gases de Lorentz

Como señalamos al final de la subsección anterior, uno de los modelos para estudiar la difusión en diversos sistemas es el denominado gas de Lorentz, el cual es un ejemplo de los llamados billares matemáticos [60]. Este modelo fue propuesto por H. A. Lorentz en 1905 y desde entonces ha servido como base para el estudio de diversos problemas tanto matemáticos como físicos en los cuales se ven involucrados fenómenos de transporte, dispersión, sistemas dinámicos, probabilidad, etc. En sus orígenes, este modelo buscaba explicar los fenómenos de conducción en los metales y partía de las siguientes hipótesis [61]:

- Todos los electrones presentes en el metal son idénticos, con una carga e y una masa m , los cuales se mueven de manera tal que su energía cinética promedio está determinada por aT , donde a es una constante y T es la temperatura absoluta del metal.
- Las colisiones entre los electrones y los átomos del metal predominan por encima de las posibles colisiones entre electrones, por lo cual estas últimas son despreciables para los efectos generales de los fenómenos de conducción.
- Para los efectos de colisión entre átomos y electrones, ambas partículas son consideradas como esferas rígidas, considerando además la posición de los átomos como inamovibles.

En pocas palabras, el modelo de gas de Lorentz contempla una partícula puntual moviéndose a través de un conjunto de obstáculos fijos centrados en los sitios de una red, donde el potencial de interacción entre la partícula y los obstáculos corresponde a un potencial de esferas duras. Una exposición más detallada sobre los gases de Lorentz y los billares se puede consultar en mi tesis de licenciatura [15].

Gases de Lorentz cuasiperiódicos

Uno de los conceptos importantes para estudiar las propiedades de transporte en los billares (en particular de los gases de Lorentz) es el concepto de horizonte. Si en una distribución espacial dada de los obstáculos de un billar, existen trayectorias de la partículas tales que no colisionan con algún obstáculo para tiempos de vuelo arbitrariamente grandes, se dice que dicho billar tiene un horizonte infinito. Por otro lado, si dada la distribución espacial de los obstáculos en un billar, toda trayectoria posible para la partícula implica una eventual colisión con algún obstáculo, se dice que dicho billar tiene un horizonte finito. Para distribuciones espaciales aperiódicas de los obstáculos en un billar existe una tercera posibilidad: que no existan trayectorias sin colisiones con obstáculos ni una cota superior para el tiempo de vuelo antes de la primera colisión; a los billares que presentan esta característica se dice que poseen un horizonte localmente finito [62].

En el 2012, Wennberg realizó una simulación numérica para conocer la distribución de vuelos libres en un gas de Lorentz cuasiperiódico unidimensional cuyos obstáculos

siguen una distribución de Fibonacci, encontrando que dicha distribución tiende a t^{-p} con $p = 1.035$ siendo t el tiempo de vuelo libre [63]. Un análisis en dimensiones más altas sobre la existencia y características de dicha distribución se puede encontrar en [64].

En el 2013, Kraemer y Sanders realizaron simulaciones numéricas en las que se muestra que la difusión para un gas de Lorentz cuasiperiódico en dos dimensiones es normal en el caso en que dicho gas presenta un horizonte finito, ligeramente superdifusivo cuando presenta un horizonte infinito y subdifusivo para tiempos cortos cuando los obstáculos se traslapan [36].

En el 2014, Marklof y Strömbergsson estudiaron la convergencia de la distribución de vuelos libres en el límite de bajas densidades para tiempos tendiendo a infinito en gases de Lorentz no periódicos formados a partir de una superposición de C gases de Lorentz periódicos con periodos inconmensurables a pares, similar al efecto presente en las maclas de penetración de algunas muestras de cristales. Entre sus resultados destaca la convergencia de la distribución a $(t^{C+2})^{-1}$ [65].

En el 2015, Kraemer, Schmiedeberg y Sanders demostraron que para gases de Lorentz cuasiperiódicos en dos dimensiones, la distribución de vuelos libres va como t^{-3} cuando el sistema presenta canales, mientras que cuando los canales se cierran, el sistema pasa a tener horizonte localmente finito y la distribución de vuelos libres va como t^{-5} [66].

4 Metodología y detalles del algoritmo

Durante el capítulo 3 sobre cuasicristales y sistemas cuasiperiódicos comentamos al respecto de una de las características más importantes y esenciales de estos sistemas, a saber, su infinita variedad de simetrías rotacionales N que pueden presentar. Esta característica representa el punto de quiebre con los cristales clásicos, los cuales poseen una limitada cantidad de simetrías posibles como pudimos constatar en el capítulo 2. Pese a lo anterior, la gran mayoría de las investigaciones en torno a sistemas cuasiperiódicos se han centrado únicamente en unas cuantas simetrías, siendo estas las correspondientes a los valores $N = 5, 6, 7, 8, 10$ y 12 [3–5, 30], con contadas excepciones para el caso $N = 18$ [47, 67]. Esta aparente falta de interés en estudiar simetrías más altas puede explicarse, en parte, por la propia naturaleza aperiódica de estos sistemas, pues si bien existen algoritmos deterministas y computables que permiten su estudio desde un enfoque computacional (como el ya mencionado método de corte y proyección), su implementación directa para altas simetrías no es factible en términos de tiempo de cómputo y memoria de almacenamiento, lo que dificulta la investigación orientada a dichos casos.

A causa de estas dificultades, una de las prácticas comunes para solucionar parcialmente estos problemas consiste en producir una región finita (aunque extensa) alrededor de un punto particular del sistema (generalmente el origen o centro de simetría global) de un tamaño específico (que depende del sistema cuasiperiódico a estudiar y sobre el cual no existe un consenso general acerca de cómo determinarlo) de modo que, al aplicar condiciones periódicas a la frontera, los efectos de borde se vean minimizados al casi hacer coincidir las posiciones reales del sistema cuasiperiódico con las posiciones de los vértices tras aplicarles la periodicidad [68, 69]. No obstante, para poder estudiar varios fenómenos de los sistemas cuasiperiódicos es necesario generar sistemas muy grandes, por ejemplo para calcular el espectro de bandas de energía [70], además de que al aumentar el rango del sistema (entendemos por rango al número mínimo de dimensiones necesarias en un espacio hiperdimensional para describir al sistema cuasiperiódico completamente), lo cual ocurre eventualmente al aumentar su simetría rotacional, los efectos derivados de usar una aproximación periódica se vuelven más notables [69].

Por otro lado, si bien la mayoría de las investigaciones iniciales sobre cuasicristales se limitaron al estudio de sólidos producidos a partir de diferentes aleaciones con una fase icosaédrica [39, 40] (lo cual pudo ser otra posible causa para centrar la

investigación en dichos sistemas y sus análogos bidimensionales), actualmente existen múltiples publicaciones sobre sistemas cuasiperiódicos en distintos campos tales como la materia condensada blanda (donde destacan los cuasicristales coloidales [44, 47, 50]) o la óptica (donde se investiga el uso de cuasicristales fotónicos en comunicación óptica [71], creación de dispositivos de filtrado óptico [72, 73], fabricación de láseres [74], encubrimiento óptico [75], entre otros). Es precisamente en estos dos campos donde se hace evidente la necesidad actual de realizar simulaciones eficientes que nos permitan explorar los sistemas cuasiperiódicos de simetrías rotacionales arbitrarias, pues a través del uso de múltiples láseres coherentes entre sí es posible producir cuasicristales fotónicos [58] o coloidales [46] de cualquier simetría rotacional, por lo que resulta deseable explorar estas posibilidades de manera computacional antes de invertir tiempo y recursos en su implementación experimental.

Como respuesta a los retos y oportunidades planteadas en los párrafos anteriores, hemos desarrollado durante los años recientes un algoritmo computacional basado en el método dual generalizado capaz de generar una vecindad local alrededor de cualquier punto en el plano para sistemas cuasiperiódicos con simetría rotacional N arbitraria. Una presentación exhaustiva sobre los detalles de este algoritmo, la teoría en la que se sustenta y algunos algoritmos complementarios empleados en su implementación se puede leer en mi tesis de maestría [16] así como en el correspondiente artículo derivado de dicha investigación [76], no obstante, en el presente capítulo haremos una exposición de los puntos más importantes contenidos en aquellos documentos al ser este algoritmo el eje central de las simulaciones con las que hemos obtenido los resultados de nuestro proyecto de investigación doctoral.

4.1. Método dual generalizado

El método dual generalizado nace como una generalización al método desarrollado por De Bruijn para obtener teselados tipo Penrose en dos dimensiones [77]. Destaca entre otros métodos por la facilidad con la que se puede establecer la simetría orientacional del sistema cuasiperiódico, aunque su implementación directa no resulta práctica para estudiar vecindades locales, pues el método en sí brinda un algoritmo para generar el teselado cuasiperiódico en su totalidad, no así alguna región en particular del mismo. A grandes rasgos, el método dual generalizado consiste en los siguientes puntos [26, 78]:

1. Sea $\mathbf{S} = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_N \mid \vec{e}_i \in \mathbb{R}^m, N \in \mathbb{Z}^+, m \in \{2, 3\}\}$ un conjunto de vectores, denominados vectores estrella, el cual determinará la simetría orientacional del teselado cuasiperiódico a construir.
2. Sea $\mathbf{G}_N = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^m \mid \vec{x} \cdot \vec{e}_i = n_i + \alpha_i + \xi_{n_i}; i \in \{1, 2, \dots, N\}, m \in \{1, 2\}, n_i \in \mathbb{Z}\}$ un conjunto infinito de planos (o rectas, en el caso 2D) ortogonales a cada uno de los vectores estrella $\vec{e}_i$. A este conjunto se le denomina un mallado en el espacio dual, donde el parámetro $\alpha_i \in \mathbb{R}$ determina un desplazamiento respecto al origen para los planos (rectas) ortogonales al vector $\vec{e}_i$ y ξ_{n_i} es una función que establece la separación entre un plano (recta) y otro, pudiendo tener

una distribución cuasiperiódica en dichas separaciones dependiendo de cómo sea definida esta función. El caso de separación equidistante unitaria entre sus elementos corresponde a fijar $\xi_{n_i} = 0$.

3. El mallado $\mathbf{G}_N$ divide al espacio (plano) en regiones abiertas ajenas, a través de las cuales no pasa ningún plano (recta). Cada una de estas regiones está especificada de manera única por la eneada de números enteros $(k_1, k_2, \dots, k_N)$, los cuales se obtienen de la siguiente manera: Sea $\vec{P}$ un punto arbitrario dentro de alguna región del mallado $\mathbf{G}_N$, el número k_i corresponde al entero n_i que aparece en la definición de $\mathbf{G}_N$ tal que $\vec{P}$ se encuentra entre los planos (rectas) ortogonales al vector $\vec{e}_i$ generados al sustituir los enteros n_i y n_{i+1} en la expresión matemática de la definición de $\mathbf{G}_N$.
4. Finalmente, los vértices de las teselas que constituyen al teselado cuasiperiódico deseado se obtienen a partir del mapeo dual que transforma cada una de las regiones abiertas en el espacio dual a un punto en el espacio real donde vive el teselado cuasiperiódico. Este mapeo está definido por la función

$$\vec{t} = \sum_{i=1}^N k_i \vec{e}_i, \quad (4.1)$$

donde $\vec{t}$ es un vértice de alguna tesela en $\mathbb{R}^3$ ($\mathbb{R}^2$).

Como podemos constatar de las definiciones matemáticas para los conjuntos $\mathbf{S}$ y $\mathbf{G}_N$, el método dual generalizado nos permite construir sistemas cuasiperiódicos en dos y tres dimensiones, con o sin simetría rotacional y manteniendo una separación equidistante entre sus elementos o no. Para el presente proyecto de investigación nos restringiremos a los casos bidimensionales, con simetría rotacional y una separación unitaria constante entre las rectas que conforman al mallado $\mathbf{G}_N$.

4.2. Coordenadas de los vértices del teselado

Tal y como se mencionó anteriormente, el método dual generalizado en su implementación original no relaciona de manera directa las coordenadas de los sitios que constituyen la red cuasiperiódica con los vectores estrella que determinan al mallado $\mathbf{G}_N$; sin embargo, es posible obtener dicha relación a partir de desarrollar la función 4.1, tomando en cuenta el criterio para determinar la eneada de números enteros $(k_1, k_2, \dots, k_N)$ mencionada en el punto 3 del desglose en puntos del método dual generalizado. Veamos a continuación cómo es que se obtiene dicha relación analítica siguiendo el algoritmo descrito por Naumis y Aragón [78]:

Sea $\mathbf{S} = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_N \mid \vec{e}_i \in \mathbb{R}^2, N \in \mathbb{Z}^+, N \geq 3\}$ un conjunto de vectores estrella tales que estos apunten a los vértices de un polígono de N lados inscrito en el círculo unitario, es decir, los vectores estrella están dados por la siguiente relación

$$\vec{e}_i = \left(\cos \left(\frac{2\pi i}{N} \right), \sin \left(\frac{2\pi i}{N} \right) \right), \quad (4.2)$$

con $i \in \{1, 2, \dots, N\}$. Definido por este conjunto de vectores estrella, considérese al mallado $\mathbf{G}_N$ descrito por

$$\mathbf{G}_N = \{\vec{x} \in \mathbb{R}^2 \mid \vec{x} \cdot \vec{e}_i = n_i + \alpha_i; n_i \in \mathbb{Z}\}, \quad (4.3)$$

con $\alpha_i \in (0, 1)$.

Sea $\vec{x}_I$ el punto de intersección de dos líneas arbitrarias del mallado $\mathbf{G}_N$ ortogonales a los vectores $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$. Las coordenadas de este punto están determinadas por la solución al sistema de ecuaciones

$$\vec{x}_I \cdot \vec{e}_j = n_j + \alpha_j, \quad \vec{x}_I \cdot \vec{e}_k = n_k + \alpha_k,$$

el cual, en forma matricial, queda expresado como

$$\begin{pmatrix} e_{jx} & e_{jy} \\ e_{kx} & e_{ky} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_I \\ y_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_j + \alpha_j \\ n_k + \alpha_k \end{pmatrix}.$$

Resolviendo para el vector (x_I, y_I) tenemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_I \\ y_I \end{pmatrix} &= \frac{1}{e_{jx}e_{ky} - e_{jy}e_{kx}} \begin{pmatrix} e_{ky} & -e_{jy} \\ -e_{kx} & e_{jx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_j + \alpha_j \\ n_k + \alpha_k \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{A_{jk}} \begin{pmatrix} e_{ky}(n_j + \alpha_j) - e_{jy}(n_k + \alpha_k) \\ -e_{kx}(n_j + \alpha_j) + e_{jx}(n_k + \alpha_k) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

donde $A_{jk} = e_{jx}e_{ky} - e_{jy}e_{kx}$ es el área del paralelogramo generado por los vectores $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$.

Dado el vector $\vec{e}_i = (e_{ix}, e_{iy})$, definimos a su vector ortogonal como $\vec{e}_i^\perp = (e_{iy}, -e_{ix})$. Empleando esta notación podemos expresar al punto de intersección $\vec{x}_I$ como

$$\vec{x}_I = \frac{1}{A_{jk}} [(n_j + \alpha_j) \vec{e}_k^\perp - (n_k + \alpha_k) \vec{e}_j^\perp]. \quad (4.4)$$

Partiendo de la hipótesis de que por cualquier punto de intersección $\vec{x}_I$ de cualesquiera dos rectas del mallado $\mathbf{G}_N$ no pasa una tercera recta, se sigue que dicho punto será vértice en común de la frontera de cuatro regiones abiertas del espacio dual (véase la figura 4.1).

Estas cuatro regiones serán mapeadas a los cuatro vértices de alguna tesela en el espacio real a través del mapeo dual 4.1. Para ello requerimos conocer los valores que toman las eneadas de enteros $(k_1, k_2, \dots, k_N)$ asociadas a cada región. Cada uno de los enteros k_i puede ser calculado al tomar la proyección del punto de intersección $\vec{x}_I$ con el correspondiente vector estrella $\vec{e}_i$, restarle a dicho número el parámetro α_i y redondear el valor obtenido a través de la función piso al mayor entero menor o igual que dicho valor. Sustituyendo en la expresión 4.1 los enteros k_i así calculados, obtenemos que uno de los vértices de alguna de las teselas del arreglo cuasiperiódico tiene por coordenadas

$$\vec{t}_{n_j, n_k}^0 = n_j \vec{e}_j + n_k \vec{e}_k + \sum_{i \neq j \neq k}^N \left[\frac{1}{A_{jk}} [(n_j + \alpha_j) \vec{e}_k^\perp - (n_k + \alpha_k) \vec{e}_j^\perp] \cdot \vec{e}_i - \alpha_i \right] \vec{e}_i. \quad (4.5)$$

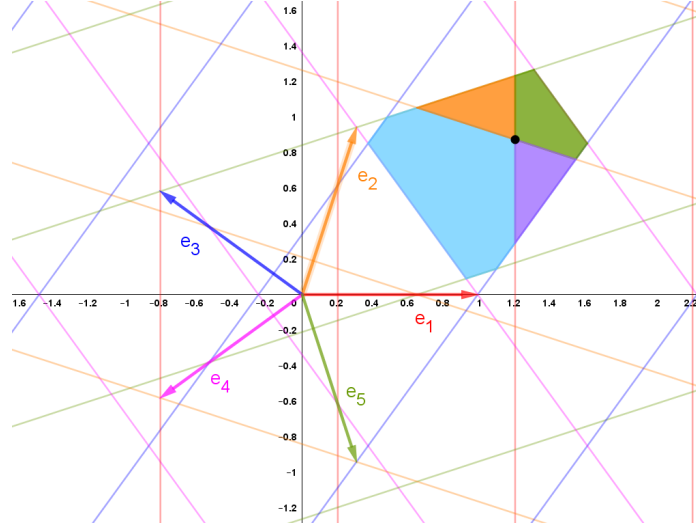


Figura 4.1: Mallado $\mathbf{G}_N$ construido a partir de un conjunto de vectores estrella $\vec{e}_i$ con simetría rotacional pentagonal y parámetros $\alpha_i = 0.2 \forall i \in \{1, \dots, 5\}$. Los colores de las líneas sólidas codifican el vector estrella al que son ortogonales. El punto negro representa al punto de intersección $\vec{x}_I$ determinado por el cruce de las líneas rectas $\vec{x} \cdot \vec{e}_1 = 1 + 0.2$ y $\vec{x} \cdot \vec{e}_2 = 1 + 0.2$. En colores sólidos se muestran las cuatro regiones abiertas asociadas a este punto.

mientras las coordenadas de los tres vértices restantes están dadas por las expresiones

$$\vec{t}_{n_j, n_k}^1 = \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_j, \quad (4.6)$$

$$\vec{t}_{n_j, n_k}^2 = \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_j - \vec{e}_k, \quad (4.7)$$

$$\vec{t}_{n_j, n_k}^3 = \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_k. \quad (4.8)$$

4.3. Descentralizando el método dual generalizado

Conociendo las expresiones 4.5-4.8 nos encontramos ahora en condiciones de construir un algoritmo capaz de generar alguna tesela del arreglo cuasiperiódico, aunque como veremos un poco más adelante, aún somos incapaces de determinar qué tesela en particular deseamos construir. Por el momento, denotemos a este algoritmo para generar alguna tesela como

$$f(j, k, n_j, n_k) = (\vec{t}_{n_j, n_k}^0, \vec{t}_{n_j, n_k}^1, \vec{t}_{n_j, n_k}^2, \vec{t}_{n_j, n_k}^3), \quad (4.9)$$

el cual tiene por parámetros de entrada un par de índices j, k (equivalente a seleccionar un par de vectores estrella del conjunto $\mathbf{S}$) y un par de números enteros n_j, n_k (equivalente a seleccionar un par de líneas ortogonales a $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$ cuya intersección determina a $\vec{x}_I$), entregando como salida del algoritmo los cuatro vértices de alguna tesela.

Como anticipábamos al comienzo de esta sección somos incapaces, a través del algoritmo 4.9, de construir una tesela en específico puesto que no contamos con algún

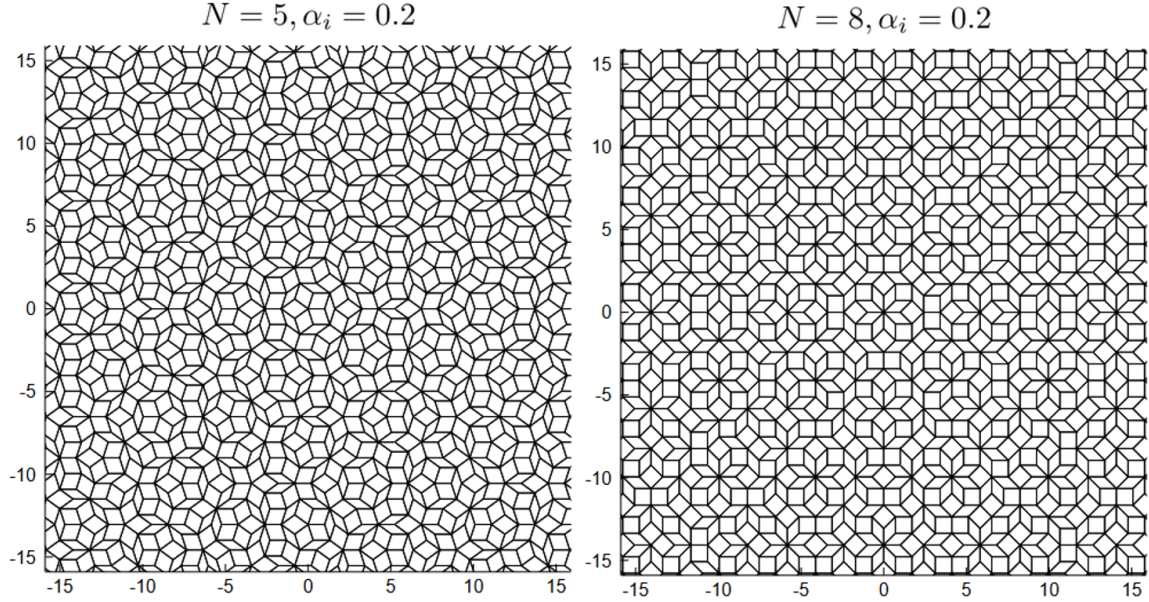


Figura 4.2: Vecindades alrededor del origen de los teselados cuasiperiódicos de simetría rotacional $N = 5$ y $N = 8$ generadas a partir de la implementación directa del algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$. En ambos casos se utilizaron los parámetros $\alpha_i = 0.2 \forall i \in \{1, \dots, N\}$.

otro algoritmo que nos permita identificar los cuatro parámetros de entrada asociados a dicha tesela. Por sí solas, las expresiones 4.5-4.8 nos permiten a lo más generar una vecindad del teselado cuasiperiódico alrededor del origen, para lo cual es necesario aplicar el algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$ considerando todas las posibles parejas de índices j, k válidas (esto es, excluyendo aquellas parejas asociadas a vectores estrella colineales, en el caso en que estos existan) así como todos los posibles valores de $n_j, n_k \in [-c, c]$ con $c \in \mathbb{Z}^+$, véase la figura 4.2.

Poder construir vecindades en torno al origen para sistemas cuasiperiódicos de simetrías rotacionales arbitrarias es un primer paso bastante útil, sin embargo, lo deseable es poder generalizar este algoritmo a fin de construir vecindades alrededor de un punto $\vec{P} \in \mathbb{R}^2$ arbitrario, dando lugar a un nuevo algoritmo

$$g(\vec{P}) = (\vec{t}_P^0, \vec{t}_P^1, \vec{t}_P^2, \vec{t}_P^3), \quad (4.10)$$

el cual, tomando como parámetro de entrada el punto $\vec{P}$ nos regresa los cuatro vértices $\vec{t}_P^i$ de la tesela del sistema cuasiperiódico que contiene en su interior a dicho punto. Cabe señalar que un algoritmo como este es construible únicamente con las expresiones 4.5-4.8, iterando múltiples veces el algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$ mientras se aumenta en cada iteración el intervalo $[-c, c]$ que determina las posibles combinaciones de la pareja de enteros n_j, n_k , lo cual se traduce en vecindades circulares en torno al origen cada vez mayores; no obstante, dicho algoritmo será ineficiente para puntos $\vec{P}$ alejados del origen debido a que la complejidad computacional en esta alternativa irá como $O(R^2)$, siendo R la distancia al origen del punto $\vec{P}$.

Con el objetivo de construir una versión eficiente del algoritmo $g(\vec{P})$ requerimos conocer, a través de algún otro algoritmo, los valores de los números enteros n_i asocia-

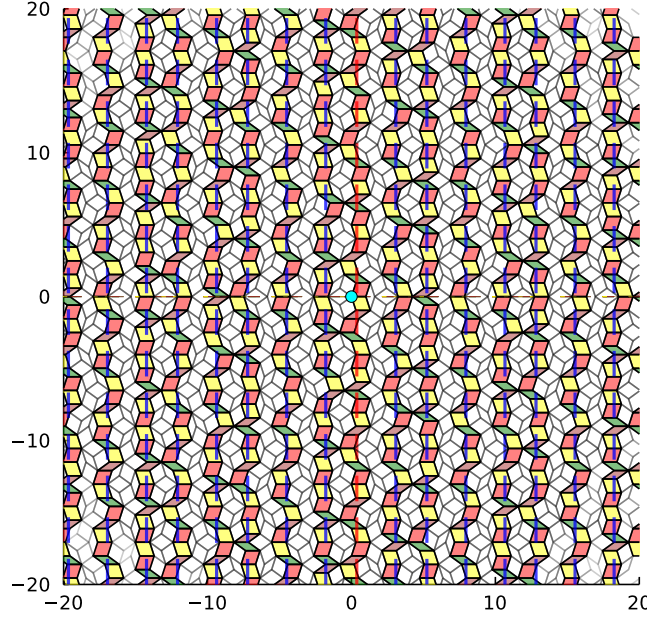


Figura 4.3: Vecindad alrededor del origen (señalado como un punto en color celeste) de un arreglo cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 5$. En color sólido están señaladas las teselas que se construyen a partir de las iteraciones de los diferentes algoritmos $f_{j,n_j}(k, n_k)$. La banda de teselas por la que pasa la recta intermitente en color rojo corresponde al caso particular de $f_{1,0}(k, n_k)$, numerándose las siguientes bandas por los consecutivos números enteros.

dos a los vectores estrella $\vec{e}_i$ que generan las teselas alrededor del punto $\vec{P}$. Para ello, observemos la forma en la que se distribuyen las teselas dentro del arreglo cuasiperiódico cuando fijamos en el algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$ los parámetros j y n_j , variando únicamente los parámetros k y n_k , denotando a este caso particular como $f_{j,n_j}(k, n_k)$. Como puede observarse en la figura 4.3 correspondiente a un teselado cuasiperiódico de simetría pentagonal, al variar los parámetros de $f_{j,n_j}(k, n_k)$, las teselas se van generando de tal forma que se agrupan formando “franjas ortogonales” al vector estrella $\vec{e}_j$, estando cada una de ellas identificada por el correspondiente número entero n_j que se usó como parámetro fijo.

Por ejemplo, la primera “franja ortogonal” de teselas a la derecha del origen (el cual está señalado por un punto en color cyan) se corresponde con el conjunto de teselas generadas por el algoritmo $f_{1,0}(k, n_k)$, de modo que la recta intermitente en color rojo está identificada por el número entero $n_j = 0$; la siguiente “franja ortogonal” de teselas a su derecha se corresponde al conjunto de teselas generadas por el algoritmo $f_{1,1}(k, n_k)$ y su correspondiente recta intermitente está identificada por el número entero $n_j = 1$ y así sucesivamente, siendo análogo el caso para las bandas a la izquierda del origen. Los colores de cada una de las teselas codifican el valor del parámetro k empleado, siendo estos los siguientes: $k = 2 \rightarrow$ rojo, $k = 3 \rightarrow$ verde, $k = 4 \rightarrow$ café y $k = 5 \rightarrow$ amarillo.

Este agrupamiento en “franjas ortogonales” es esencial para definir un algoritmo que nos permita conocer los números enteros n_i asociados a las teselas que rodean al

punto $\vec{P}$ ya que, si dichas “franjas” estuvieran separadas entre sí por una distancia promedio y existiera una cota superior para la máxima separación entre dos de estas “franjas” consecutivas, entonces podríamos aproximar el valor de los números enteros n_i simplemente “contando” cuántas de estas “franjas” se han atravesado desde el origen hasta llegar al punto $\vec{P}$ en cada una de las direcciones de los vectores estrella. Afortunadamente, ambas condiciones se satisfacen para los sistemas cuasiperiódicos que estamos analizando.

Para demostrar esta aseveración, lo primero que necesitamos tomar en cuenta es que los métodos de corte y proyección y el método dual generalizado son equivalentes [34]. En un sentido más estricto, el método dual generalizado es un método de construcción más general que los métodos de corte y proyección pues es capaz de producir redes cuasiperiódicas que no pueden construirse a partir de estos últimos métodos si al momento de definir el mallado $\mathbf{G}_N$ en el espacio dual se permite que las rectas ortogonales a los vectores estrella tengan una distancia no constante entre sí, lo cual es posible gracias a la presencia de la función ξ_{n_i} [78]; sin embargo, recordemos que para el presente trabajo estamos considerando únicamente aquellos casos en los que $\xi_{n_i} = 0$, hipótesis que nos permite considerar completamente equivalentes ambos métodos. Lo anterior es importante puesto que, aún y cuando los teselados cuasiperiódicos que construimos provienen del método dual generalizado, podemos pensarlos como resultado de aplicar un método de corte y proyección, de modo que podemos interpretar a los vértices de las teselas que conforman a nuestros sistemas como un objeto de dimensión $N - 2$ que pasa a través de un hipercubo de dimensión N [36] (siendo N el número de vectores estrella requeridos por el método dual generalizado) al cual denominamos el dominio de aceptación. Bajo esta perspectiva, cambiar el valor del número entero n_i significa moverse a algún hipercubo vecino, de modo que la distancia entre los dominios de aceptación estará acotada por algún valor que depende de la inclinación de estos dominios dentro de los hipercubos y de la dimensión N del hiperespacio. Por otro lado, la separación promedio entre estos dominios de aceptación existe y está bien definida dado que dichos dominios de aceptación son finitos en su extensión. De esta manera, dada la equivalencia entre los métodos, la distancia entre las “franjas” de teselas que mencionábamos en los párrafos previos debe tener un promedio bien definido que depende del conjunto de vectores estrella, así como una cota máxima para la distancia entre dos “franjas” consecutivas.

Aseguradas las hipótesis que requerimos para aproximar el valor de los números enteros n_i , procedamos a calcular dichas aproximaciones. Una manera de “contar” el número de “franjas” que se necesitan atravesar desde el origen para llegar al punto $\vec{P}$ es proyectar dicho punto con el vector unitario $\hat{e}_i$ que apunta en la misma dirección que el vector estrella $\vec{e}_i$ y dividir el resultado por la separación promedio entre las bandas. Dado que esta operación no necesariamente arrojará un número entero, es necesario redondear dicho valor al entero más cercano. Expresado en notación matemática, esto es

$$n_i = \left\lfloor \frac{\vec{P} \cdot \hat{e}_i}{d_A} \right\rfloor, \quad (4.11)$$

donde d_A es la separación promedio entre las “franjas” de teselas y $\lfloor \cdot \rfloor$ es la función

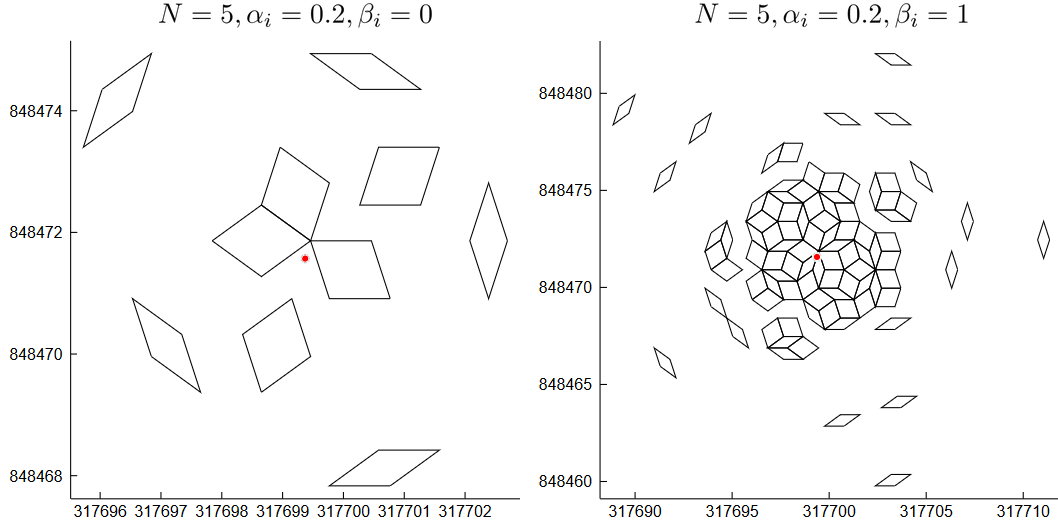


Figura 4.4: Vecindad local de un teselado cuasiperiódico con simetría rotacional $N = 5$. En la imagen de la izquierda podemos observar las teselas generadas por el algoritmo $g(\vec{P})$ sin considerar margen de error al aproximar los enteros n_i ($\beta_i = 0 \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}$). En la imagen de la derecha se muestran las teselas generadas al considerar un margen de error $\beta_i = 1 \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}$. El punto $\vec{P}$ está señalado por un punto rojo en ambas imágenes.

que redondea al entero más cercano. Para el caso particular en el que el teselado cuasiperiódico es simétrico y unitario (es decir, que los vectores estrella que lo producen corresponden a los vértices de un polígono regular de N lados inscritos en el círculo unitario), la separación promedio entre bandas d_A es igual a $N/2$.

Por último, es importante mencionar que, de manera general, la primera “franja” asociada al entero n_j no pasará por el origen, por lo que, aunado al redondeo mencionado en el párrafo anterior, puede ser necesario considerar un margen de error para cada uno de los números enteros aproximados por la expresión 4.11. Debido a esto, cuando se generen las teselas asociadas al par de vectores estrella $\vec{e}_j, \vec{e}_k$ debemos considerar el par de enteros m_j, m_k con $m_i \in [n_i - \beta_i, n_i + \beta_i]$ donde $\beta_i \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$ es el margen de error a considerar para el entero n_i . Este parámetro β_i determina a su vez el tamaño de la vecindad del arreglo cuasiperiódico que se construirá en torno al punto $\vec{P}$: a mayor valor de β_i , mayor tamaño de la vecindad generada. Véase la figura 4.4.

Es esta aproximación 4.11 la que nos permite, en conjunto con el algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$, construir una versión eficiente del algoritmo $g(\vec{P})$, pues dado un punto arbitrario $\vec{P}$ en el plano, ahora tenemos una manera de conocer los parámetros de entrada que requiere el algoritmo $f(j, k, n_j, n_k)$ para construir únicamente aquellas teselas que están cercanas al punto $\vec{P}$.

4.4. Vecindad principal y teselas aisladas

Una vez que hemos revisado los puntos más importantes sobre el método dual generalizado y la manera en la que podemos, a partir de él, generar un algoritmo eficiente $g(\vec{P})$ para construir una vecindad local del teselado cuasiperiódico alrededor de cualquier punto arbitrario $\vec{P}$ en el plano, nos falta revisar una última cuestión sobre su implementación orientada a los casos de estudio de nuestro proyecto.

Iterando el algoritmo $g(\vec{P})$ para todas las combinaciones válidas de parejas de vectores estrella con sus correspondientes pares de números enteros (considerando el margen de error β_i) somos capaces de generar diferentes teselas alrededor del punto arbitrario $\vec{P}$ que hayamos elegido de tal forma que dichas teselas serán adyacentes unas a otras. Llamaremos a dicho conjunto de teselas adyacentes la “vecindad principal”. Sin embargo, en este mismo proceso se generarán algunas teselas que no forman parte de este conjunto como se puede apreciar en la imagen de la derecha dentro de la figura 4.4. A estas teselas que se encuentran aisladas, ya sea de manera individual o bien, formando a su vez otros conjuntos de teselas, las denominaremos “teselas aisladas”. El principal problema que presentan las teselas aisladas es que en su mayoría están constituidas por unas cuantas teselas, o incluso por una sola de ellas, de manera que no son útiles para estudiar la estructura local de los sistemas puesto que no cuentan con sus primeros vecinos bien definidos o, en el caso de las simulaciones sobre fenómenos de transporte, al no estar conectadas estas regiones con la vecindad principal, no hay forma de darle continuidad a la trayectoria de la partícula. Por estos motivos, dado que las teselas aisladas sólo consumen recursos computacionales y no nos son útiles, deseamos eliminarlas.

Para ello, consideremos el teselado de Voronoi que se forma con los centroides de las teselas generadas por el algoritmo $g(\vec{P})$. El área de las celdas de Voronoi asociadas a los centroides de las teselas aisladas o bien, a las teselas que conforman la frontera de algún conjunto de teselas, será mayor que el área de las celdas de Voronoi de las teselas que conforman el interior de la vecindad principal, las cuales están acotadas superiormente por un valor A , véase la figura 4.5. Tomando en cuenta esta característica, definimos la magnitud r_{min} como la mínima distancia entre el punto $\vec{P}$ y los centroides cuyas celdas de Voronoi poseen un área mayor que A . Eliminando todas aquellas teselas cuyos centroides están a una distancia mayor que r_{min} con respecto a $\vec{P}$, conservamos únicamente un subconjunto circular de la vecindad principal, desechando en el proceso a todas las teselas aisladas, véase la figura 4.6.

Una implementación general sobre nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ en el lenguaje de programación JULIA puede consultarse y descargarse desde la dirección <https://github.com/AlanRodrigoMendozaSosa/Quasiperiodic-Tiles>.

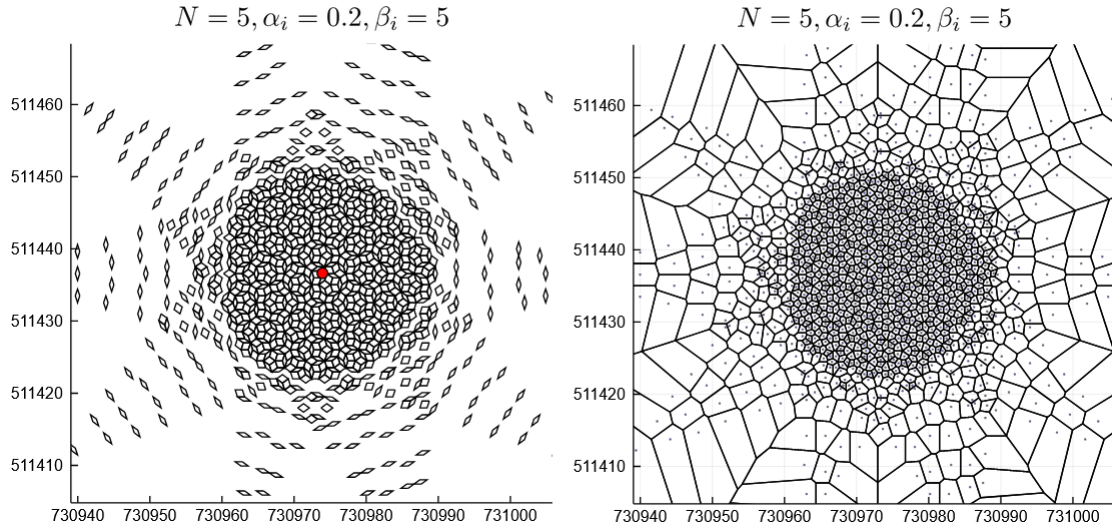


Figura 4.5: Comparativa entre la vecindad local de un teselado cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 5$ (imagen a la izquierda) y su teselado de Voronoi correspondiente (imagen a la derecha). En rojo, el punto arbitrario $\vec{P}$ en torno al cual se construyó la vecindad local del teselado cuasiperiódico, mientras que en la imagen de la derecha se representan los centroides de las teselas que dan lugar al teselado de Voronoi a través de pequeños puntos de color negro.

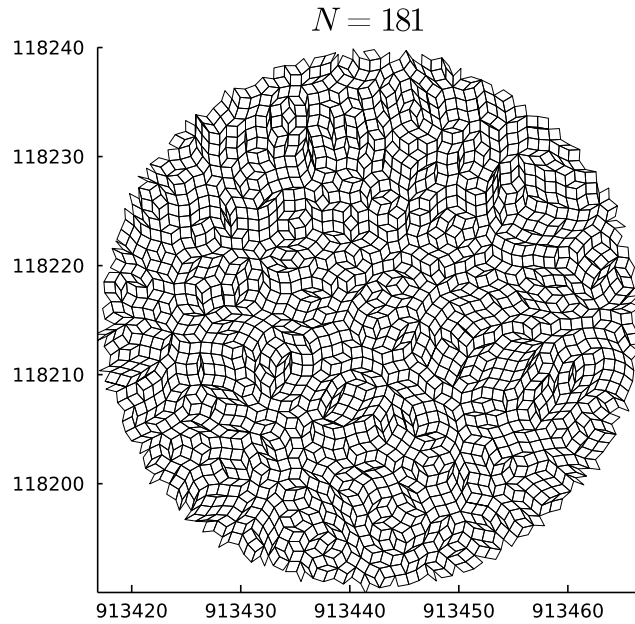


Figura 4.6: Vecindad principal de un teselado cuasiperiódico con simetría rotacional $N = 181$ alrededor de un punto arbitrario $\vec{P} = (913441.87, 118215.02)$.

5 Resultados

En el presente capítulo haremos una exposición detallada de los resultados obtenidos a lo largo de nuestra investigación sobre sistemas cuasiperiódicos de altas simetrías. Para este punto daremos por hecho que el lector está familiarizado con el contenido de los capítulos previos, en particular con el capítulo 4 en el que se presentan las generalidades del algoritmo computacional que hemos desarrollado para construir estructuras cuasiperiódicas de manera eficiente.

Los resultados de las secciones 5.1 y 5.2 fueron publicados anteriormente en los artículos [76,79], mientras que los resultados de la sección 5.3 aún no han sido publicados. Los algoritmos empleados para obtener los datos que sustentan estos resultados están disponibles en la dirección <https://github.com/AlanRodrigoMendozaSosa/Quasiperiodic-Tiles>.

5.1. Difusión en gases de Lorentz cuasiperiódicos

Uno de los aspectos más destacables de nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ para generar sistemas cuasiperiódicos es su capacidad de construir vecindades locales alrededor de cualquier punto en el plano, esto nos permite realizar de manera eficiente simulaciones sobre la dinámica de una partícula sujeta a potenciales de corto alcance dentro de un entorno cuasiperiódico, tan lejos del centro de simetría global y por tiempos tan largos como sea necesario. Tomando ventaja de esta característica, hemos estudiado la dinámica de una partícula dura y puntual dentro de los denominados “gases de Lorentz cuasiperiódicos” para dos casos de estudio en concreto: en el primero de ellos hemos validado el funcionamiento de nuestro algoritmo al reproducir los resultados publicados previamente por Kraemer, Schmiedeberg y Sanders [66] sobre la transición entre los distintos tipos de horizonte presentes en un sistema cuasiperiódico particular; en el segundo caso hemos analizado la relación entre la distribución de la longitud de vuelos libres y el rango del sistema cuasiperiódico en el límite de Boltzmann-Grad. En ambos casos hemos empleado un potencial de esferas duras, es decir, la trayectoria de la partícula dentro del gas de Lorentz corresponde al de una partícula libre hasta que esta colisiona con un obstáculo, tras lo cual su trayectoria se modifica considerando una reflexión especular en el plano tangencial al punto de colisión con el obstáculo, conservando la energía cinética.

Tomando en cuenta lo anterior, el algoritmo para generar estas simulaciones es el siguiente:

1. Se selecciona, con una probabilidad uniforme, un punto arbitrario $\vec{P} \in \mathbb{R}^2$ dentro de una región cuadrada de lado 2×10^6 centrada en el origen.
2. Se produce una región circular de radio R del teselado cuasiperiódico a estudiar centrada en el punto $\vec{P}$ a partir de nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ basado en el método dual generalizado. El valor numérico de R depende de la simetría orientacional del sistema y del parámetro β de nuestro algoritmo (véase la sección 4.3). Los valores α_i (véase las ecuaciones 4.8) fueron fijados al valor 0.2 para todos los casos.
3. Centrados en los vértices de las teselas del teselado cuasiperiódico construido en el paso anterior se colocan discos de radio r , los cuales se corresponden con los obstáculos del gas de Lorentz.
4. Se verifica que el punto $\vec{P}$ no esté dentro de algún obstáculo que conformará al gas de Lorentz a estudiar; es decir, se comprueba que la distancia entre $\vec{P}$ y cualquiera de los vértices de las teselas del teselado cuasiperiódico generado en el punto anterior sea mayor al radio de los obstáculos. En caso de que esta condición no se satisfaga, se descarta el punto $\vec{P}$ y se comienza nuevamente el presente algoritmo.
5. Se define una segunda región circular de radio $R_s = 0.5R$ centrada en $\vec{P}$. Esta región circular constituye una zona de seguridad en la cual la partícula va a poder moverse dentro de ella sin preocuparnos por las posibles dificultades que se presentan en la frontera de la región circular de radio R , tales como la ausencia de la tesela que contendrá a la partícula conforme esta avanza en su trayectoria. Una vez que la partícula abandone esta zona de seguridad, será necesario volver a generar una nueva vecindad local del sistema cuasiperiódico en torno a la última posición conocida de la partícula.
6. Se genera el teselado de Voronoi asociado a los vértices de las teselas producidas en el paso 2 a través del algoritmo de Fortune [80]. En este punto se localiza la celda de Voronoi que contiene al punto $\vec{P}$ en su interior.
7. Se definen las condiciones iniciales de una partícula dentro del gas de Lorentz, tomando como posición inicial al punto $\vec{P}$ y como velocidad inicial un vector unitario con un ángulo $\theta_v \in [0, 2\pi)$ respecto al eje horizontal positivo, siendo este ángulo elegido de manera aleatoria con una probabilidad uniforme.
8. Se calcula el tiempo de vuelo que tardará la partícula en colisionar con el obstáculo del gas de Lorentz asociado a la celda de Voronoi en donde actualmente se localiza, así como el tiempo de vuelo que tardará en abandonar su actual celda de Voronoi ignorando la presencia de obstáculos.
9. Si el menor tiempo calculado en el paso anterior corresponde a un cambio en la celda de Voronoi, se actualiza la posición de la partícula asumiendo una trayectoria de partícula libre hasta que esta entra a una nueva celda de Voronoi,

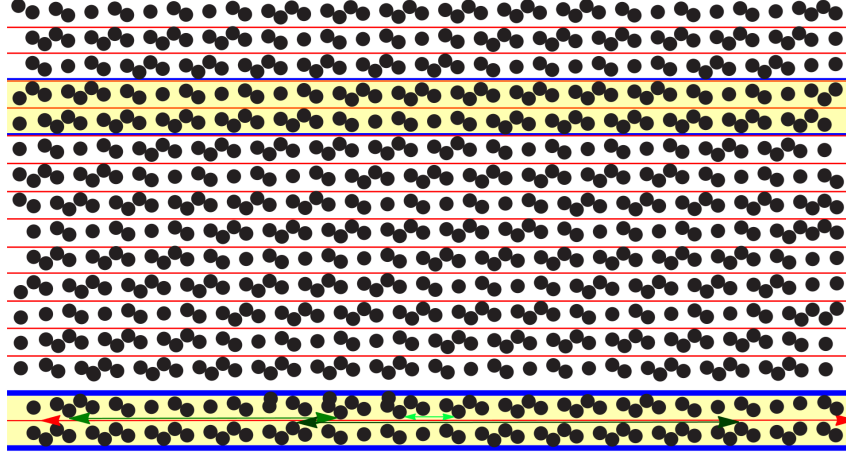


Figura 5.1: Distribución espacial de los obstáculos que conforman al gas de Lorentz cuasiperiódico estudiado en el artículo [66]. En la parte inferior de la imagen se muestra un canal presente en este sistema, así como algunas posibles trayectorias de la partícula en la misma dirección que el canal. Imagen adaptada de [66] con permiso del autor.

conservando la velocidad de la partícula. Si el menor tiempo corresponde a una colisión entre la partícula y el obstáculo del gas de Lorentz, se actualiza la posición de la partícula hasta el punto en donde colisionan y se actualiza la velocidad de la partícula, asumiendo una colisión especular.

10. Se iteran los pasos 8 y 9 hasta que el tiempo de vuelo acumulado de la partícula alcanza el valor deseado, tras lo cual se regresa al paso 1. Si en algún momento la partícula abandona la región circular de radio R_s definida en el paso 5, se itera el paso 2 sustituyendo a $\vec{P}$ por la última posición conocida de la partícula y se continúa con el algoritmo.

5.1.1. Horizonte localmente finito

De acuerdo a lo expuesto en 3.5.3, los gases de Lorentz pueden clasificarse de acuerdo al tipo de horizonte que poseen. Para el caso cuasiperiódico, una misma distribución espacial de los obstáculos que conforman al gas de Lorentz puede dar lugar a los tres tipos de horizontes, siendo el tamaño de dichos obstáculos lo que determine cuál de estos se hará presente. Para el caso de un horizonte infinito, la distribución de la longitud de vuelos libres sigue una ley de potencias con un exponente -3 , mientras que para el caso de un horizonte localmente finito, la distribución de la longitud de vuelos libres sigue una ley de potencias con un exponente -5 [66].

En la publicación original de Kraemer, Schmiedeberg y Sanders, el gas de Lorentz cuasiperiódico estudiado por los autores fue construido a partir del método de corte y proyección, definiendo una red periódica en un espacio tridimensional (con los respectivos obstáculos del gas definidos en este espacio) dentro de la cual una partícula se desplaza sobre un subespacio bidimensional. En la figura 5.1 se muestra una vecindad local de dicho sistema.

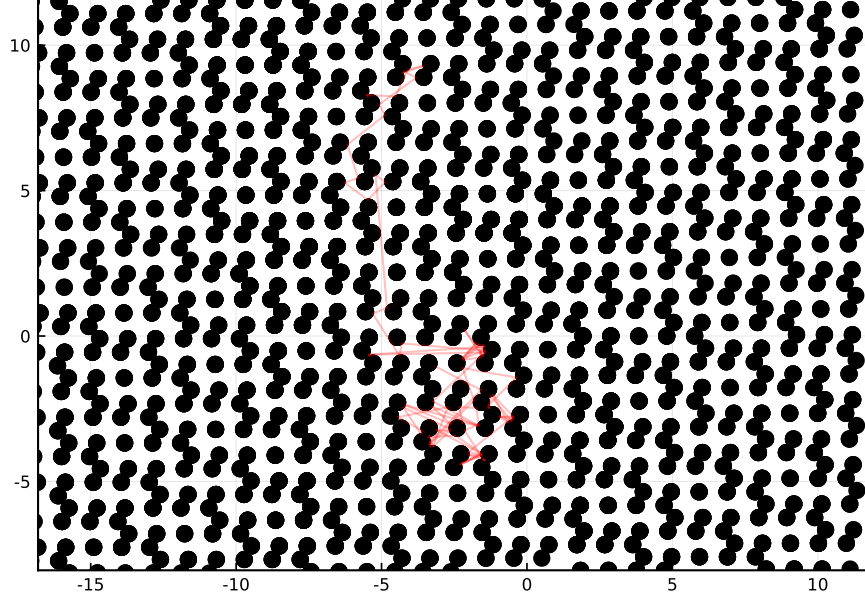


Figura 5.2: Reproducción del gas de Lorentz estudiado en [66] usando el método dual generalizado. En color rojo se muestra una trayectoria arbitraria de una partícula dentro del sistema sujeta a un potencial de esferas duras.

Para generar esta misma distribución espacial de obstáculos a través del método dual generalizado requerimos un conjunto de 3 vectores estrella, los cuales deben ser ortogonales a las proyecciones de los vectores $\vec{v}_i$ que generan la red periódica en $\mathbb{R}^3$ [34]. En concreto estos vectores estrella son

$$\vec{w}_1 = (0.12861712428405658, -0.8851314226378474),$$

$$\vec{w}_2 = (-0.961044638791549, 0.0),$$

$$\vec{w}_3 = (0.24464430831499137, 0.46534112719498627).$$

Empleando este conjunto de vectores estrella obtendremos un sistema idéntico al producido por el método de corte y proyección, salvo una rotación y un factor de escala (véase la figura 5.2).

Debido a este factor de escala, el radio crítico para los obstáculos a partir del cual el sistema presenta un horizonte localmente finito será distinto al reportado originalmente, pero el comportamiento debería mantenerse invariante para cada régimen. Para estimar el factor de escala k requerimos conocer el valor del radio crítico, es decir, el radio para el cual la distribución de la longitud de vuelos libres $\rho(l)$ presenta un comportamiento de ley de potencias con exponente -5 . Con el objetivo de disminuir el ruido presente en los datos, se analiza tanto la función $\rho(l)$ como la función de distribución acumulativa (o *CDF* por sus siglas en inglés) definida como $CDF(l) = \int_0^l \rho(x)dx$; nótese que si $\rho(l) = \exp(-\lambda l)$, entonces $1 - CDF(l) \propto \exp(-\lambda l)$, mientras que si $\rho(l) = al^{-b}$, entonces $1 - CDF(l) \propto l^{-(b-1)}$, con lo cual, el radio crítico corresponderá a aquel valor para el cual la función $1 - CDF(l)$ se comporta como una ley de potencias con exponente -4 .

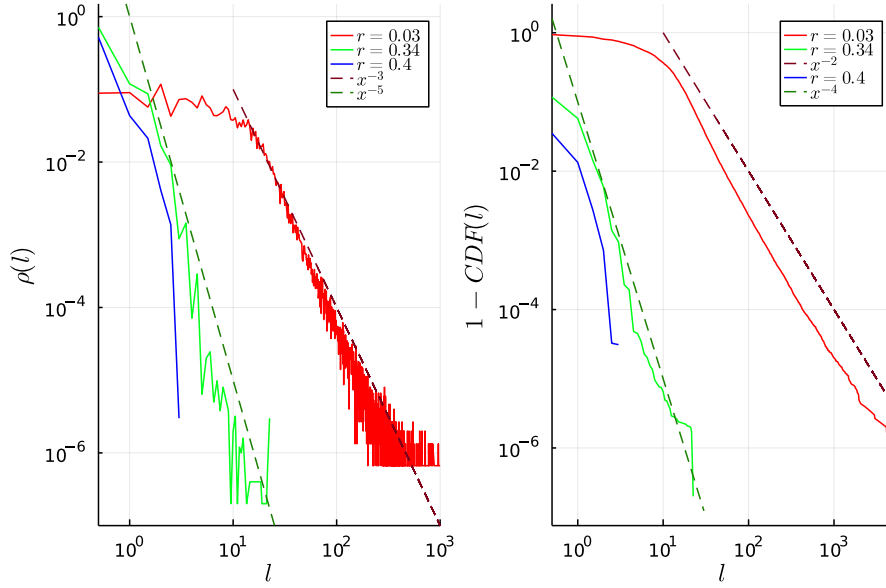


Figura 5.3: Distribución de vuelos libres $\rho(l)$ (izquierda) y $1 - CDF(l)$ (derecha) como función de la longitud del vuelo libre l para los radios de obstáculos $r = 0.03$ (rojo), $r = 0.34$ (verde) y $r = 0.4$ (azul). Las líneas intermitentes corresponden a las leyes de potencias con exponentes -3 (rojo oscuro) y -5 (verde oscuro) en la imagen de la izquierda, así como -2 (rojo oscuro) y -4 (verde oscuro) en la imagen de la derecha.

Para esta simulación hemos considerado 10^6 vuelos libres para cada uno de los radios de los obstáculos en el intervalo $[0.01, 0.5]$ tomando una separación de 0.01 entre cada uno de ellos. Una vez identificado el candidato a radio crítico, hemos incrementado el número de vuelos libres a 10^7 para los radios cercanos a dicho valor. Encontramos que el radio crítico $r_c \sim 0.34$. Dividiendo este valor por el radio crítico calculado en [66] ($r_c \sim 0.309$) obtenemos $k \sim 1.10032362$. La figura 5.3 muestra la distribución de vuelos libres $\rho(l)$ y la función $1 - CDF(l)$ para los radios $r = 0.03, 0.034$ y 0.4 . Para el valor de $r = 0.03$ se analizaron 3×10^6 vuelos libres, mientras que para los valores $r = 0.034$ y $r = 0.4$ se analizaron 10^7 vuelos libres. Estos tres radios son los equivalentes a los radios analizados en la publicación original. Como ayuda visual hemos añadido en líneas intermitentes las leyes de potencias con exponentes -3 y -5 en la gráfica de $\rho(l)$, así como aquellas con exponentes -2 y -4 en la gráfica de $1 - CDF(l)$. Los resultados obtenidos coinciden con los reportados en la publicación original.

5.1.2. Límite de Boltzmann-Grad

Dentro del contexto de los gases de Lorentz, el límite de Boltzmann-Grad (también conocido como el límite de baja densidad) consiste en reducir el radio de los obstáculos que conforman al gas mientras se “ajusta” el número de obstáculos de manera que el número promedio de colisiones que experimenta una partícula en un periodo de tiempo dado permanece constante. Este “ajuste” al número de obstáculos es equivalente a un

re-escalamiento en la longitud de los vuelos libres, de modo que si $r \rightarrow 0$, entonces la longitud de los vuelos libres escala por un factor proporcional a r^{d-1} , siendo r el radio de los obstáculos y d la dimensión del espacio en el que existe el gas de Lorentz [81].

Estudiar la distribución de la longitud de vuelos libres en el límite de Boltzmann-Grad es relevante no sólo por su importancia matemática, sino también por su papel en la resolución de la ecuación cinética de Boltzmann, así como su conexión (en el caso de los gases de Lorentz periódicos) con la distribución de los “gaps” energéticos en el oscilador armónico cuántico bidimensional [82]. Si bien esta distribución se ha estudiado de manera exhaustiva en los casos periódicos [81, 83–89], su análogo cuasiperiódico ha recibido menos atención [63, 64, 66], debido en parte a la dificultad para generar simulaciones numéricas donde se evite el uso de aproximantes [36, 63].

Para los gases de Lorentz cuasiperiódicos que no poseen simetría rotacional (como el estudiado en la sección anterior), se ha mostrado la existencia de canales en los cuales las partículas pueden tener vuelos libres de longitud infinita [36], similar a los canales presentes en el caso periódico. Estos canales pueden bloquearse si se aumenta el tamaño de los obstáculos hasta un radio crítico, como se mostró en las gráficas contenidas en la figura 5.3, dando paso a una transición en el tipo de horizonte que presenta el sistema. Sin embargo, para los gases de Lorentz cuasiperiódicos con simetría rotacional cabe la posibilidad de que sólo presenten horizontes finitos y/o localmente finitos [36], escenarios para los cuales no se conoce su distribución [64].

En el caso de los gases de Lorentz cuasiperiódicos con simetría rotacional N , se ha demostrado que estos pueden ser contruidos por la proyección de una red periódica definida en $\mathbb{R}^N$ [90]. Esta manera de pensar a este subconjunto de los gases de Lorentz cuasiperiódicos como resultado de la aplicación del método de corte y proyección nos resulta fundamental para poder entender el comportamiento esperado en sus distribuciones de la longitud de vuelos libres, pues nos permite pensar a la partícula que se desplaza dentro de nuestro sistema cuasiperiódico como la “sombra” de otra partícula moviéndose en un espacio de dimensión mayor dentro de una distribución periódica de obstáculos, con lo que es factible pensar que la distribución de la longitud de vuelos libres se comportará de manera similar a la distribución presente en un gas de Lorentz periódico [81]; no obstante, la analogía entre ambos casos no es tan directa y es necesario tomar en cuenta algunas diferencias de fondo entre el gas de Lorentz periódico y su análogo cuasiperiódico para que esta hipótesis sea justificable.

En el caso periódico, la distribución de la longitud de vuelos libres puede ser calculada a partir de conocer la probabilidad de que un cilindro, apuntando en alguna dirección arbitraria, de la misma dimensión d que la dimensión del espacio donde vive el gas de Lorentz, de longitud l (la longitud del vuelo libre) y radio r contenga un punto de la red periódica. Esto es equivalente a la probabilidad de que un vértice de la red periódica, al rotarse el sistema de manera aleatoria, intersecte a un cilindro centrado en el eje X . En el caso cuasiperiódico, cada trayectoria de la partícula está constreñida a moverse en un plano completamente irracional al espacio de dimensión N que lo contiene (pensando en los métodos de corte y proyección), lo cual es equivalente a considerar que la partícula se mueve en una celda unitaria con condiciones periódicas a la frontera [36]. En este caso, los cilindros no apuntan en alguna dirección, sino que cubren toda la celda periódica.

Por lo anterior, en lugar de medir la probabilidad de que un punto de la red esté contenido dentro del cilindro, para el caso cuasiperiódico debemos considerar un politopo (esto es, una generalización a cualquier dimensión del polígono bidimensional) de dimensión $N - d$ centrado en los vértices de la red periódica de dimensión N y ortogonal al plano de movimiento de la partícula. Este politopo es la proyección del hipercubo unitario en el espacio ortogonal, el cual está acotado interior y exteriormente por dos bolas. Entre mayor sea la dimensión del hipercubo, más cercanos estarán los valores de los radios de las dos bolas entre sí, de modo que si $N \gg 1$, los politopos pueden aproximarse por esferas de dimensión $N - d$. La cuestión es ahora calcular la probabilidad de que un cilindro de longitud l atravesase una esfera de dimensión $N - d$ centrada en los sitios de la red periódica de dimensión N . Debido a que el plano de movimiento de la partícula es completamente irracional y las esferas son “planas” (de dimensión $N - d$), es de esperar un comportamiento similar en las distribuciones de vuelos libres a pesar de las diferencias señaladas entre ambos casos.

En un gas de Lorentz periódico, la cola de la distribución de la longitud de vuelos libres se ajusta a una ley de potencias con exponente -3 , siendo dominante este comportamiento para probabilidades menores a $\frac{2^{2-d}}{d(d+1)\zeta(d)}$ (teorema 1.14 de [81]), donde d es la dimensión en la que vive el gas de Lorentz periódico y $\zeta(d) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^d}$ es la función zeta de Riemann, la cual es aproximadamente 1 para $d \gg 2$. Si bien mencionamos anteriormente que los gases de Lorentz cuasiperiódicos con simetría rotacional N pueden ser generados a partir de la proyección de una red periódica en $\mathbb{R}^N$, esto no implica que en la expresión anterior podamos sustituir directamente d por N , pues los métodos de corte y proyección permiten emplear una dimensión mayor a la mínima requerida para producir diferentes redes cuasiperiódicas. Este valor mínimo de la dimensión necesaria para producir una red cuasiperiódica en particular es conocido como el rango $\phi(N)$. Es este valor $\phi(N)$ y no la simetría rotacional N el que determina la dimensión equivalente del gas de Lorentz cuasiperiódico visualizado como un gas de Lorentz periódico en altas dimensiones. De esta manera, en los gases de Lorentz cuasiperiódicos con simetría rotacional N , esperamos que la cola de la distribución de la longitud de vuelos libres siga un comportamiento como ley de potencias con exponente -3 para probabilidades menores a $\frac{2^{2-\phi(N)}}{(\phi(N))(\phi(N)+1)\zeta(\phi(N))}$.

La razón detrás de este comportamiento como ley de potencias en la cola de la distribución se debe a la existencia de canales (u horizontes principales) dentro del sistema [91]. El ancho del canal (de dimensión $d - 1$ para sistemas periódicos o $\phi(N) - 1$ para sistemas cuasiperiódicos) es lo que delimita esta probabilidad. Un menor ancho del canal significa una cota superior menor para la probabilidad a partir de la cual domine el comportamiento de la ley de potencias. Como mencionamos un par de párrafos atrás y con la aclaración referente al uso de $\phi(N)$ en lugar de N , para el caso cuasiperiódico estamos interesados en calcular la probabilidad de que un cilindro intersecte un politopo de dimensión $\phi(N) - d$, por lo que al considerar valores de $\phi(N)$ mayores, el ancho de estos canales se irá reduciendo, y por consecuencia, la probabilidad a partir de la cual el comportamiento de la ley de potencias se vuelve dominante. Más aún, en el límite en el que d tiende a infinito, la cola de la distribución de vuelos libres para el caso periódico tiende a una distribución exponencial según se

reporta en [92]. Debido a esto, esperamos encontrar este comportamiento en el límite de $N \rightarrow \infty$ para el caso cuasiperiódico si para un $\phi(N)$ bajo encontramos una ley de potencias con exponente -3 .

Hasta este punto, todos los argumentos y resultados mencionados son válidos únicamente para vuelos largos, por lo que no tenemos información acerca del comportamiento de la distribución para vuelos cortos. Para el caso periódico bidimensional, la distribución de vuelos libres para vuelos cortos sigue un comportamiento constante [82, 83], algo que no se mantiene al incrementar la dimensión del gas de Lorentz. De acuerdo a la revisión bibliográfica que hemos realizado, no sabemos de resultados analíticos para vuelos cortos en sistemas de dimensión diferente a dos.

Para obtener qué tipo de distribución obtendremos para probabilidades mayores a $\frac{2^{2-\phi(N)}}{(\phi(N))(\phi(N)+1)\zeta(\phi(N))}$ es necesario realizar simulaciones. Llegados a este momento vale la pena mencionar que el uso de la notación $\phi(N)$ para el rango del sistema cuasiperiódico no es fortuito y obedece al hecho de que este valor puede calcularse a partir de la función phi de Euler aplicada a la simetría rotacional del sistema cuasiperiódico N . Teniendo esto en cuenta, para los gases de Lorentz cuasiperiódicos con simetría rotacional $N = 5, 8$ y 12 ($\phi(N) = 4$) esperamos observar el mismo comportamiento en la cola de sus distribuciones, donde la ley de potencias debería hacerse visible a partir de $2^{4-2} \cdot 4 \cdot 5 = 80$ vuelos libres. Sin embargo, para una simetría rotacional $N = 7$ ($\phi(N) = 6$), esperaríamos encontrar la ley de potencias a partir de $2^{6-2} \cdot 6 \cdot 7 = 672$ vuelos libres, mientras que para una simetría rotacional $N = 13$ ($\phi(N) = 12$) esta debería verse a partir de $2^{12-2} \cdot 12 \cdot 13 = 159744$ vuelos libres. Así, a pesar de tener una simetría rotacional muy cercana en los arreglos cuasiperiódicos con $N = 7$ y $N = 8$, así como en aquellos con $N = 12$ y $N = 13$, esperamos un comportamiento notablemente diferente en sus distribuciones de vuelos libres.

Hemos llevado a cabo simulaciones en sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional $N = 5, 7, 12, 13, 17$ y 73 , así como en los sistemas periódicos de simetría $N = 3$ y $N = 4$, analizando en cada caso 10^5 vuelos libres entre obstáculos, excepto en el caso de simetría rotacional $N = 13$ para el cual obtuvimos 6×10^5 vuelos libres (esto con el objetivo de observar mejor la desviación al decaimiento exponencial en la distribución de la longitud de vuelos libres). En todos los casos el radio de los obstáculos fue $r = 5 \times 10^{-4}$. Debido a que la distribución de la longitud de vuelos libres $\rho(l)$ presenta mucho ruido, lo cual complica la visualización en una misma gráfica de los datos correspondientes a todos los casos analizados, hemos empleado en su lugar la función de distribución acumulativa $CDF(l)$; en la gráfica de la izquierda contenida en la figura 5.4 mostramos $1 - CDF(l)$ con una escala logarítmica en el eje Y , mientras que en la gráfica de la derecha presentamos las mismas distribuciones pero con una escala logarítmica en ambos ejes. Cada una de las curvas se ha ajustado a una función de la forma $a_1 \exp(a_2 l) + a_3 l^{-2}$, donde a_1 , a_2 y a_3 son los parámetros de ajuste.

El conjunto de los parámetros correspondientes al mejor ajuste en cada una de las diferentes simetrías rotacionales representativas de cada grupo se muestra en la tabla 5.1.

Nótese que en general los valores de los parámetros a_2 y a_3 disminuyen conforme el rango del sistema aumenta, volviéndose dominante el comportamiento exponencial.

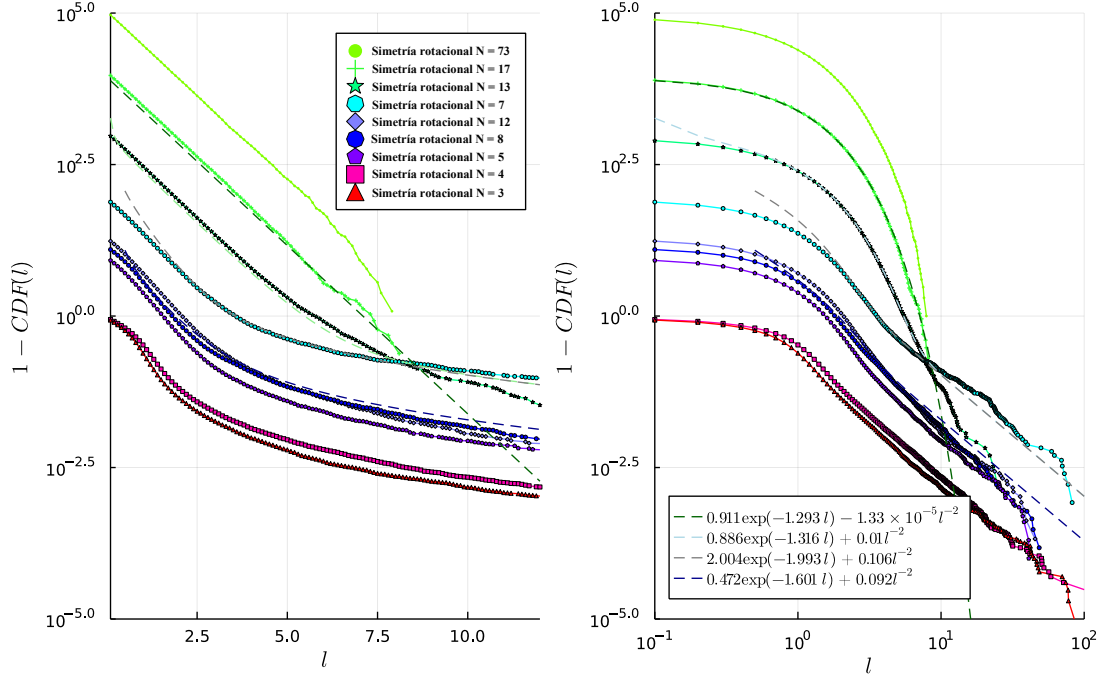


Figura 5.4: Gráficas de la función de distribución acumulativa $1 - CDF(l)$ como función de la longitud de vuelo libre l para gases de Lorentz cuasiperiódicos de diferentes simetrías rotacionales. Las gráficas en rojo corresponden directamente a $1 - CDF(l)$, mientras que a aquellas por encima de estas se les aplicó un factor de 10, 15, 21, 10^2 , 10^3 , 10^4 y 10^5 para una mejor visualización.

N	a_1	a_2	a_3
5	0.47 ± 0.06	-1.60 ± 0.05	0.09 ± 0.01
7	2.00 ± 0.64	-1.99 ± 0.12	0.11 ± 0.01
13	0.89 ± 0.01	-1.31 ± 0.01	0.01 ± 0.01
17	0.91 ± 0.04	-1.29 ± 0.02	$-1.33 \times 10^{-5} \pm 0.00221$

Tabla 5.1: Valores de los parámetros a_1 , a_2 y a_3 del ajuste realizado a las distribuciones $1 - CDF(l)$ por la función $a_1 \exp(a_2 l) + a_3 l^{-2}$.

De hecho, para la mayor parte de los datos correspondientes a sistemas con un rango mayor o igual a 12 (esto es, simetrías rotacionales $N = 13, 17$ y 73), la distribución se ajusta bastante bien empleando únicamente una función exponencial.

Con base en estos resultados, observamos que al incrementar el rango de los sistemas cuasiperiódicos, la región donde la parte exponencial de la distribución de la longitud de vuelos libres domina también se ve incrementada, de modo que la distribución completa tiende a ser una distribución exponencial en el límite donde $\phi(N) \rightarrow \infty$, similar a las distribuciones obtenidas para gases de Lorentz desordenados con una distribución de Poisson para sus obstáculos. Estos resultados son contrarios a los que se han observado anteriormente en simulaciones numéricas de gases de Lorentz cuasiperiódicos en el límite de Boltzmann-Grad [63], y parecen estar en desacuerdo con los resultados expuestos en [64], donde cualquier arreglo cuasiperiódico de obstáculos muestra una distribución no exponencial en el límite en que $l \rightarrow \infty$. Esta aparente contradicción no lo es en realidad, puesto que para cualquier rango $\phi(N) < \infty$ esperamos que la cola de la distribución de la longitud de vuelos libres presente un comportamiento de ley de potencias con exponente -3 en el límite $l \rightarrow \infty$, sin embargo, el valor de l a partir del cual este comportamiento de ley de potencias se vuelve dominante crece de manera muy rápida conforme $\phi(N)$ aumenta. Estos resultados dejan abiertas varias preguntas: En el límite de altas simetrías rotacionales ¿Qué distribución espacial poseen los sitios de una red cuasiperiódica? ¿Es similar a una distribución de Poisson? ¿O quizás forman un estado atascado? [93, 94].

5.2. Análisis estructural local en cuasicristales

Motivados por las preguntas generadas a partir de los resultados obtenidos en la sección anterior, hemos estudiado la estructura local de los sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional N para valores en los que $N \gg 5$. Conocer las características de los entornos locales de estos sistemas, en términos de la organización espacial de sus átomos o moléculas, es importante no sólo en la búsqueda de las respuestas a las preguntas mencionadas anteriormente, sino también como punto de partida en el estudio de algunas propiedades de estos materiales tales como la estructura de bandas electrónica o fotónica, la conductividad térmica o eléctrica, la dureza del material, su elasticidad, entre otras.

Para este propósito nos servimos una vez más de la propiedad que presenta nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ para generar vecindades locales de los sistemas cuasiperiódicos alrededor de puntos arbitrarios en el plano. Esta característica es esencial para poder llevar a cabo estudios referentes a la estructura de los sistemas cuasiperiódicos de alta simetría rotacional pues, contrario a lo que ocurre en los sistemas de baja simetría rotacional, la estructura local que presentan estos sistemas en torno al centro de simetría global difiere completamente de la estructura local presente alrededor de un punto arbitrario lejos de dicho centro, situación que puede apreciarse en la figura 5.5.

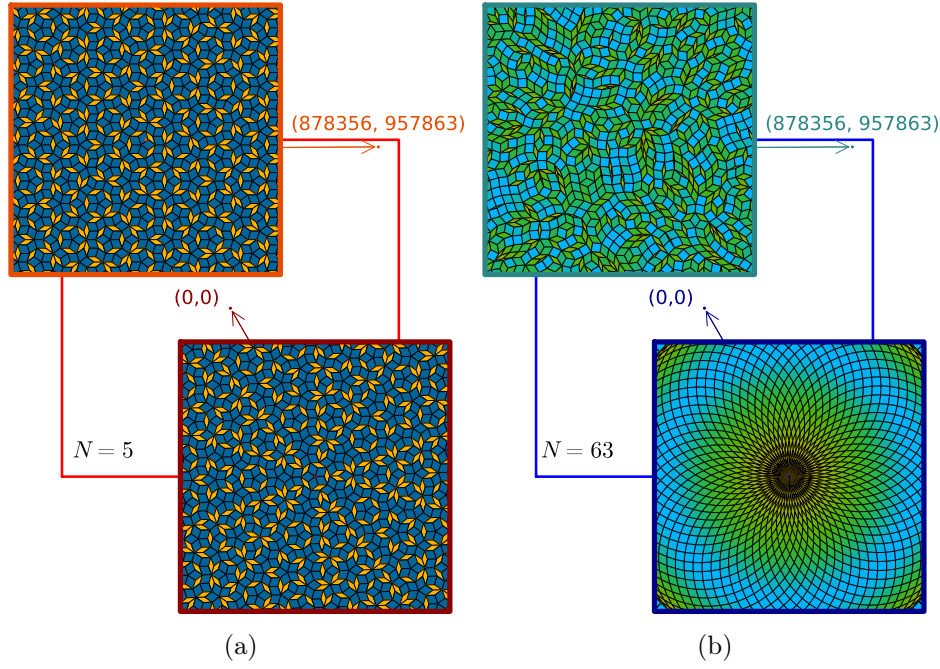


Figura 5.5: Comparativa entre vecindades locales de sistemas cuasiperiódicos cerca y lejos del centro de simetría global. (a) Teselado cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 5$ alrededor del centro de simetría global $(0,0)$ y alrededor del punto $(878356, 957863)$. (b) Teselado cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 63$ alrededor de los mismos puntos que en (a) y (b). Los colores codifican el área de las teselas.

En concreto, hemos estudiado dos propiedades de las redes cuasiperiódicas como función de su simetría rotacional N , siendo estas la distribución de la distancia al vecino más cercano y la distribución del área de sus celdas de Voronoi. Ambas distribuciones se presentan desde un enfoque analítico basado en argumentos geométricos, así como en un análisis estadístico de un gran número de vecindades generadas de manera computacional.

5.2.1. Distribución de la distancia al vecino más cercano

Para comenzar, consideremos un teselado cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 5$, construido mediante el método dual generalizado a partir de un conjunto de vectores estrella unitarios, como el que se puede observar en la figura 5.5 (a). Este sistema está compuesto por dos tipos diferentes de teselas, una “delgada” y una “gorda” [95]. Si la longitud de sus aristas está normalizada, entonces estas teselas pueden ser catalogadas a partir de la longitud de su eje menor $\bar{a}$, siendo estos valores $\bar{a}_1 = \sqrt{(5 - \sqrt{5})/2} \approx 1.175$ y $\bar{a}_2 = 1/\phi \approx 0.618$, donde ϕ denota la proporción áurea. Estos valores sólo permiten dos posibles distancias al vecino más cercano para cualquier sitio de la red, la distancia unitaria 1 y la distancia de $1/\phi \approx 0.618$.

Al incrementar la simetría rotacional de los sistemas cuasiperiódicos, el número de

teselas diferentes que componen al sistema aumenta, por lo que la distribución de la distancia al vecino más cercano también se verá modificada. Considerando lo anterior resulta natural realizarse las siguientes preguntas: ¿Cuántas teselas diferentes existen para una simetría rotacional N ? ¿Cuál es la probabilidad de encontrar cada una de dichas teselas a lo largo del sistema? ¿Cómo se ve modificada la distribución de la distancia al vecino más cercano en función de la simetría rotacional N ? ¿Existe una distribución límite cuando $N \rightarrow \infty$?

Con el fin de responder a estas preguntas, primero calcularemos de manera analítica la probabilidad asociada a cada una de las diferentes teselas que conforman al sistema cuasiperiódico de simetría rotacional N ; posteriormente, a partir del resultado previo y asumiendo que cualquier arreglo de teselas es posible (siempre y cuando no se solapen entre sí ni dejen espacios vacíos), aproximaremos la función de distribución de frecuencias de la distancia al vecino más cercano. Finalmente, se detallarán los cálculos numéricos con los cuales se construyó la distribución de la distancia al vecino más cercano de manera computacional y se mostrará la comparativa con el cálculo analítico.

Antes de comenzar, vale la pena hacer una aclaración importante: la hipótesis referente a la posibilidad de tener cualquier arreglo de teselas alrededor de cualquier punto de la red cuasiperiódica es claramente falsa para simetrías rotacionales bajas, donde dependiendo de la clase de isomorfismo local, algunas configuraciones están prohibidas [96], no obstante, como podremos constatar con los resultados numéricos, para simetrías rotacionales altas, los datos se ajustan a la expresión analítica derivada a partir de esta hipótesis.

Distribución de las teselas

Como revisamos en la sección 4.2, a partir del método dual generalizado es posible obtener las expresiones analíticas para los cuatro vértices $\vec{t}_{n_j, n_k}^a$, con $a \in \{0, 1, 2, 3\}$ de alguna tesela del sistema, siendo estas expresiones:

$$\begin{aligned} \vec{t}_{n_j, n_k}^0 &= n_j \vec{e}_j + n_k \vec{e}_k + \sum_{i \neq j \neq k}^N \left[\frac{1}{A_{jk}} [(n_j + \alpha_j) \vec{e}_k^\perp - (n_k + \alpha_k) \vec{e}_j^\perp] \cdot \vec{e}_i - \alpha_i \right] \vec{e}_i, \\ \vec{t}_{n_j, n_k}^1 &= \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_j, \quad \vec{t}_{n_j, n_k}^2 = \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_j - \vec{e}_k, \quad \vec{t}_{n_j, n_k}^3 = \vec{t}_{n_j, n_k}^0 - \vec{e}_k, \end{aligned} \quad (5.1)$$

donde los vectores $\vec{e}_k$ corresponden a los N vectores estrella que definen la simetría rotacional del teselado cuasiperiódico, los números enteros n_k corresponden a los N parámetros que determinan qué tesela en concreto se genera, los parámetros $\alpha_k \in (0, 1)$ están relacionados con la clase de isomorfismo presente en el sistema, el valor $A_{jk} = e_{jx}e_{ky} - e_{jy}e_{kx}$ está relacionado con el área formada por los vectores $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$, siendo e_{jx} , e_{kx} y e_{jy} , e_{ky} las componentes x y y , respectivamente; el vector $\vec{e}_k^\perp$ denota el vector ortogonal a $\vec{e}_k$ y $\lfloor x \rfloor$ es la función piso que regresa el mayor entero menor o igual que x .

Si bien estas expresiones no imponen alguna restricción a los vectores estrella, en la presente sección trabajaremos bajo la suposición de que los vectores $\vec{e}_k$ son aquellos

vectores que apuntan a los vértices de un polígono regular de N lados inscrito en el círculo unitario. Esta elección de vectores estrella es la que nos garantiza que el sistema cuasiperiódico a estudiar posea una simetría rotacional N .

Tomando en cuenta estas consideraciones, si N es un número par, existen $N/2$ vectores estrella que serán anti paralelos a algún otro vector del restante conjunto de $N/2$ vectores estrella. En este caso, para cada par anti paralelo de vectores $\vec{e}_i, \vec{e}_j$ que cumpla la condición de que $\alpha_i = \alpha_j$, las ecuaciones 5.1 producirán el mismo teselado independientemente de cuál de los dos vectores se emplee en dichas expresiones. Lo anterior implica que si N es de la forma $2(2n - 1) = 4n - 2$, con $n \in \mathbb{N}$ y $\alpha_i = \alpha$ para todo valor de i , entonces las ecuaciones 5.1 producirán el mismo sistema cuasiperiódico que si sólo se considera un conjunto de $N/2$ vectores estrella no colineales; por ejemplo, los casos con simetría rotacional $N = 5$ y $N = 10$ producirán la misma red si todos los parámetros α_i son iguales, sin embargo, si no todos los parámetros α_i toman el mismo valor, entonces los teselados producidos en cada caso serán diferentes.

Aunado a lo anterior y como consecuencia de solicitar que el polígono regular de N lados que determina a los vectores estrella esté inscrito en el círculo unitario, los lados de las teselas que conforman a los sistemas cuasiperiódicos tendrán una longitud unitaria. Dada esta restricción, las diferentes teselas sólo se distinguirán unas de otras a partir de sus ángulos internos. Nótese que los sitios de las redes cuasiperiódicas que estamos interesados en estudiar se corresponden a los vértices de las teselas que constituyen al teselado cuasiperiódico. Esto implica que la distancia d entre cualquier sitio de la red cuasiperiódica y su vecino más cercano estará acotada superiormente por 1, de manera que $d = \min(1, \bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_v)$, siendo $\bar{a}_i$ las longitudes de las diagonales de las v teselas que comparten como vértice al sitio de la red cuasiperiódica de interés.

Estas teselas poseen la forma de rombos equiláteros con ángulos opuestos iguales θ' y $\gamma' = \pi - \theta'$, siendo $\theta \leq \pi/2$ el menor de ambos. Tal y como se puede comprobar de las ecuaciones 5.1, estos rombos son producidos por la combinación de dos vectores estrella arbitrarios $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$, siendo el ángulo que se forma entre ellos el que determina los ángulos internos del rombo. En el contexto del método dual generalizado, cada región poligonal en el espacio dual representa un vértice $\vec{v}$ en el espacio real, mientras que cada vértice en el espacio dual corresponde a una tesela en el espacio real. De esta manera, un polígono con n vértices en el espacio dual se transforma en un vértice en el espacio real compartido por n teselas. Para ejemplificar esto, pensemos en la situación presentada en la figura 5.6, donde se muestra la transformación de una región triangular en el espacio dual (indicada en color amarillo a la izquierda de la imagen) a un vértice $\vec{v}$ en el espacio real (señalado por un punto amarillo a la derecha de la imagen), rodeado por tres rombos. Nótese como los ángulos externos (γ'_{ij}) del polígono en el espacio dual se corresponden a los ángulos internos de las teselas alrededor del vértice $\vec{v}$.

De manera general, cada par de vectores estrella formará un ángulo $\theta' = i\pi/N$, con $i \in [2, 4, \dots, N - 2]$ si N es un número par o bien, con $i \in [2, 4, \dots, N - 1]$ si N es un número impar; en consecuencia, el otro ángulo tomará los valores $\gamma' = j\pi/N$ con $j \in [N - 2, N - 4, \dots, 2]$ si N es un número par o, en su defecto, con $j \in [N - 2, N - 4, \dots, 1]$ si N es un número impar.

Para el caso de simetrías rotacionales pares, dado que los índices i y j comparten

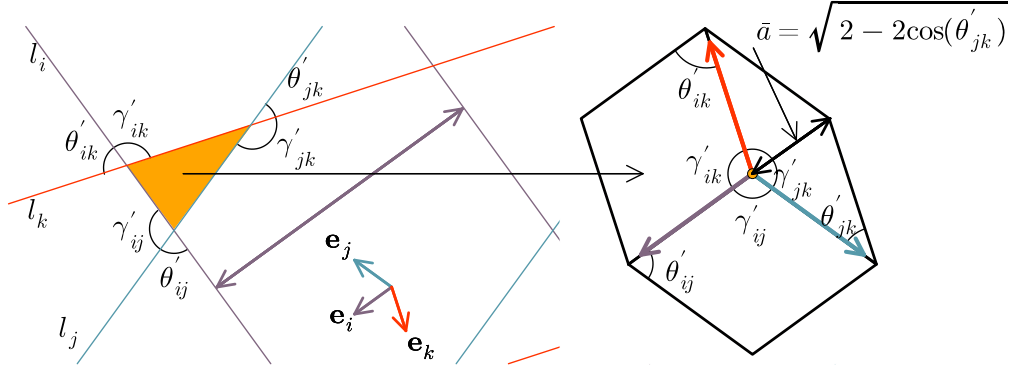


Figura 5.6: Esquema de la transformación dual empleada en el método dual generalizado. Los ángulos γ'_{ij} , γ'_{ik} , γ'_{jk} , θ'_{ij} , θ'_{ik} y θ'_{jk} son los ángulos que se forman al intersecarse a pares las líneas ortogonales a los vectores estrella $\vec{e}_i$, $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$ que delimitan un área triangular en el espacio dual. Estos ángulos se corresponden a los ángulos internos de las tres teselas que comparten un mismo vértice en el espacio real.

el mismo conjunto de posibles valores, basta con considerar únicamente la mitad de ellos, lo cual nos produce un total de $\lfloor N/4 \rfloor$ teselas diferentes. Por otro lado, para simetrías rotacionales impares, necesitamos obtener los ángulos $\theta = \min(\theta', \gamma')$ para todos los posibles valores que toman ambos ángulos primados, lo que se traduce en conservar la mitad de los posibles valores para i y la mitad de los posibles valores para j , de donde obtendremos un total de $\lfloor N/2 \rfloor$ teselas diferentes.

Indistintamente del caso, la longitud del eje menor de un rombo está dado por

$$\bar{a} = \sqrt{2 - 2\cos(\theta)}, \quad (5.2)$$

donde θ es el menor de los dos ángulos internos del rombo. Esta función es biyectiva si nos restringimos al intervalo $\theta \in [0, \pi/2]$, por lo que los valores de $\bar{a}$ obtenidos serán todos diferentes; debido a esto, dado cualquier par de vectores estrella $\vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$ con sus respectivos enteros n_j y n_k , la probabilidad de obtener cualquiera de las posibles teselas es uniforme, a excepción de los casos en donde N es un múltiplo de 4, pues en ellos la tesela cuadrada generada al considerar $\theta = \pi/2$ posee una probabilidad igual a la mitad de la probabilidad del resto de las teselas.

Lo anterior implica que la probabilidad de producir una tesela en particular es igual a $\frac{1}{\lfloor N/2 \rfloor}$ si N es impar, mientras que dicha probabilidad es $\frac{1}{\lfloor N/4 \rfloor}$ si N es par, pero no un múltiplo de 4. Si N es un múltiplo de 4, la probabilidad para una tesela no cuadrada es $\frac{4}{N-2}$, mientras que si la tesela es cuadrada tiene una probabilidad de $\frac{2}{N-2}$. Salvo que se indique explícitamente lo contrario, en el resto de la sección omitiremos este caso especial.

Dentro del intervalo $\theta \in [0, \pi/2]$ la función 5.2 puede tomar valores mayores que la unidad, no obstante, recordemos que la distancia al vecino más cercano está acotada superiormente por 1, por lo que para calcular el número de diferentes valores posibles para la distancia al vecino más cercano necesitamos considerar únicamente aquellos valores de $\bar{a}$ que no superen dicho valor. Esta consideración adicional se

traduce en solicitar que $\theta' < \pi/3$ o $\gamma' < \pi/3$, lo cual nos arroja un total de $\lfloor N/6 \rfloor + \lceil \text{mod}(N, 3)/N \rceil$ y $\lfloor N/3 \rfloor + \lceil \text{mod}(N, 3)/N \rceil$ valores distintos para $\bar{a}$ (incluyendo el valor $\bar{a} = 1$) en el caso en que N sea par o impar, respectivamente.

Tras las observaciones anteriores, estamos en condiciones de abordar la siguiente cuestión: Dada una posición aleatoria en el espacio real de nuestro sistema cuasiperiódico ¿Cuál es la probabilidad de encontrar en dicha posición un tipo de tesela en particular? Puesto que la probabilidad de producir una tesela en particular es constante para todas las teselas, la probabilidad de encontrar en alguna posición arbitraria del plano un tipo de tesela en particular es proporcional al área del tipo de tesela que nos interesa. Esta área, dado que las teselas tienen aristas de longitud unitaria, es igual a $\sin(\theta)$; así, la probabilidad de encontrar una tesela con un ángulo θ dado es igual a

$$p(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\sum_{i=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \sin(2i\pi/N)} = 2 \tan\left(\frac{\pi}{2N}\right) \sin(\theta), \quad (5.3)$$

si N es impar. Si N es par, pero no un múltiplo de 4, esta probabilidad está dada por

$$p(\theta) = \frac{\sin(\theta)}{\sum_{i=1}^{\lfloor N/4 \rfloor} \sin(2i\pi/N)} = 2 \tan\left(\frac{\pi}{N}\right) \sin(\theta). \quad (5.4)$$

De manera alternativa, estas probabilidades pueden expresarse en términos de $\bar{a}$. Si invertimos la ecuación 5.2 obtenemos que $\theta(\bar{a}) = \arccos(1 - \bar{a}^2/2)$, de modo que las ecuaciones 5.3 y 5.4 quedan expresadas como

$$p_1(\bar{a}) = \bar{A} \sin\left(\arccos\left(1 - \bar{a}^2/2\right)\right), \quad (5.5)$$

donde

$$\bar{A} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \sin(2i\pi/N)} = 2 \tan\left(\frac{\pi}{2N}\right), \text{ si } N \text{ es impar}$$

o

$$\bar{A} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\lfloor N/4 \rfloor} \sin(2i\pi/N)} = 2 \tan\left(\frac{\pi}{N}\right), \text{ si } N \text{ es par.}$$

Los datos numéricos se aproximan cada vez más a la función de probabilidad $p_1(\bar{a})$ conforme se incrementa la simetría rotacional del sistema cuasiperiódico (y por tanto, la cantidad de teselas diferentes que lo conforman); véase la figura 5.7 para observar la comparativa entre ambas probabilidades en el caso $N = 1009$.

Distancia al vecino más cercano

Como consecuencia de que cada sitio en nuestra red cuasiperiódica se corresponde con algún vértice de las teselas que constituyen al teselado cuasiperiódico y dado que en general cada vértice será compartido por v teselas, la distancia al vecino más cercano d asociada a cada uno de estos sitios está determinada por la menor de las longitudes de los v ejes menores de las teselas que comparten dicho vértice. En el caso en el que todos estos ejes tengan una longitud mayor a 1 (lo cual puede ocurrir si algún vértice se encuentra rodeado únicamente por teselas “gordas” en las que

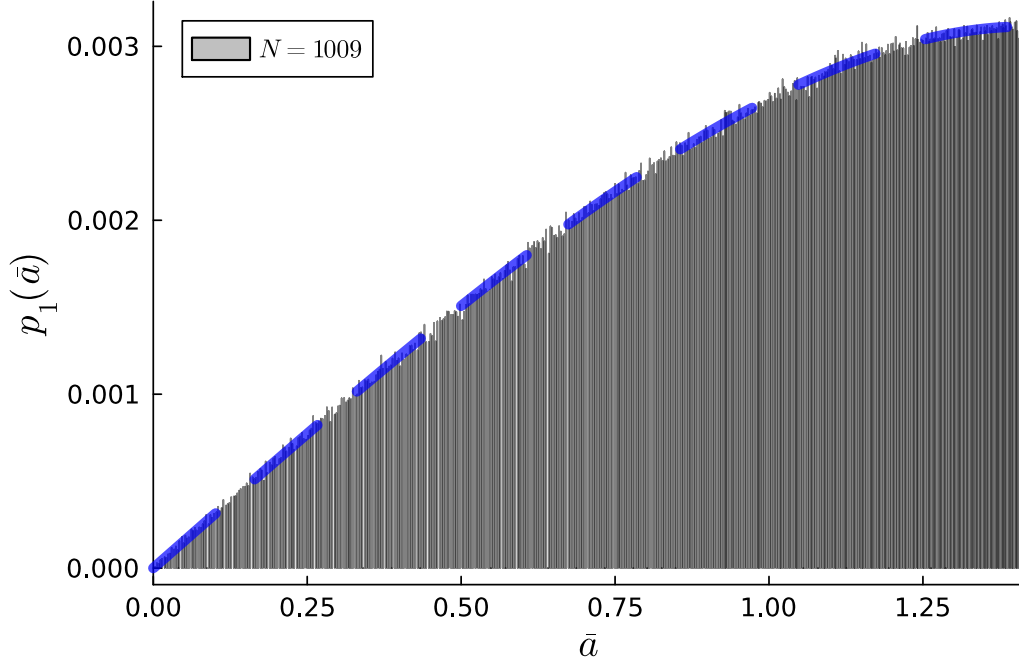


Figura 5.7: Probabilidad de aparición de las diferentes teselas como función de la longitud de su semieje menor $\bar{a}$ para un teselado cuasiperiódico con simetría rotacional $N = 1009$. El histograma se obtuvo a partir de una muestra de 1×10^6 teselas, mientras que la línea discontinua corresponde a la función 5.5.

ambas diagonales son mayores que 1 y por teselas “delgadas” cuyo eje mayor pasa por el vértice en cuestión), entonces la distancia al vecino más cercano tomará el valor unitario. Esta característica nos permite aproximar la densidad de probabilidad asociada a la distancia al vecino más cercano a partir de asumir diferentes valores para v .

Una primera aproximación consiste en asumir que $v = 1$, es decir, que cada vértice pertenece únicamente a una tesela. En este escenario será suficiente calcular la densidad de probabilidad de obtener un valor $\bar{a} \in [0, 1)$ considerando la distribución completa de los posibles valores para las diagonales de las teselas, no sólo aquellos menores a la unidad. Esta densidad de probabilidad, en términos del ángulo θ , está dada por

$$\rho_1(\theta)d\theta = A(\sin(\theta))d\theta, \quad (5.6)$$

donde A es una constante de normalización.

Deseamos expresar esta densidad de probabilidad en términos de $\bar{a}$, para lo cual necesitamos relacionar a $d\theta$ con $d\bar{a}$. De la ecuación 5.2, diferenciando ambos lados de la igualdad tenemos

$$\begin{aligned} d\bar{a} &= \frac{1}{2} (2 - 2\cos(\theta))^{-1/2} (2\sin(\theta)) d\theta, \\ \implies d\bar{a} &= \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{2 - 2\cos(\theta)}} d\theta, \end{aligned}$$

de donde, al despejar $d\theta$ y expresar a θ en términos de $\bar{a}$, nos queda

$$d\theta = \frac{\bar{a}}{\sin(\arccos(1 - \bar{a}^2/2))} d\bar{a}. \quad (5.7)$$

Sustituyendo en 5.6 la expresión 5.7 y expresando nuevamente todo en términos de $\bar{a}$, tenemos

$$\begin{aligned} \rho_1(\theta)d\theta &= A (\sin(\arccos(1 - \bar{a}^2/2))) \left(\frac{\bar{a}}{\sin(\arccos(1 - \bar{a}^2/2))} d\bar{a} \right) = A\bar{a}d\bar{a}, \\ \implies \rho_1(\bar{a})d\bar{a} &= A\bar{a}d\bar{a}; \quad A = \frac{1}{\int_0^2 a' da'} = \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde los límites de integración en la definición de A corresponden a los valores de los ejes del caso degenerado en el que la tesela tiende a una línea recta.

Queda claro que la anterior no es una buena aproximación, pues la hipótesis en la que se basa (que cada vértice pertenezca a únicamente a una tesela) no es válida ya que en cualquier teselado cuasiperiódico siempre existirán al menos tres teselas que compartan un mismo vértice. Para llegar a una mejor aproximación, veamos qué ocurre si asumimos ahora un valor $v = 2$, es decir, que cada vértice es compartido únicamente por dos teselas. Para este escenario vamos a suponer que cualquier configuración espacial de dos teselas alrededor de un mismo vértice es posible y calcularemos la probabilidad de que la diagonal que pasa por el vértice de la segunda de las teselas tenga una longitud $\bar{a}_2$ dado que la diagonal de la primera de las teselas tiene una longitud $\bar{a}_1$. En este punto queremos resaltar una vez más el hecho de que en un cuasicristal perfecto no siempre es posible encontrar cualquier configuración espacial de sus teselas, siendo esta condición satisfecha en su lugar por un teselado aleatorio; sin embargo, la distribución de teselas que estamos considerando es la de un cuasicristal perfecto, por lo que no esperamos que los resultados siguientes sean válidos para teselados más generales.

Pensemos para este caso donde $v = 2$ en el espacio dual de nuestro teselado cuasiperiódico y consideremos un segmento s de algún polígono en dicho espacio formado por la intersección de una línea l_i con las líneas l_j y l_k , ortogonales cada una de ellas a su respectivo vector estrella $\vec{e}_i, \vec{e}_j$ y $\vec{e}_k$. Este polígono no es intersectado por ningún otra línea del mallado en el espacio dual. Denominemos al punto de intersección de las líneas l_i y l_j como x_{ij} y al punto de intersección de las líneas l_j y l_k como x_{jk} . Si fijamos las rectas l_i y l_k , mientras que desplazamos a la línea l_k con respecto a x_{ik} en la dirección de $\vec{e}_j$, la longitud de s va a verse modificada. Dado que la distancia entre dos líneas paralelas consecutivas en el espacio dual es constante e igual a 1, el máximo desplazamiento de cualquier línea l_j está acotada por este valor unitario. En el caso límite en el que $N \rightarrow \infty$, la máxima longitud de s es 1, puesto que, en caso contrario, este segmento sería intersectado por algún otra línea del mallado casi ortogonal a s . Esto impone un valor máximo al desplazamiento de l_j igual a $\sin(\theta'_{ij})$. Análogamente, si fijamos l_i y l_j , desplazando ahora a l_k , el máximo desplazamiento para esta última línea será igual a $\sin(\theta'_{ik})$. Por consiguiente, de todos los posibles desplazamientos d_j y d_k de las líneas l_j y l_k , sólo aquellos que satisfacen que $d_j < \sin(\theta'_{ij})$

y $d_k < \sin(\theta'_{ik})$ pueden producir un segmento del polígono consistente con los ángulos internos θ'_{ij} y θ'_{ik} . En consecuencia, podemos aproximar la probabilidad de producir un polígono con un segmento s como $\sin(\theta'_{ij}) \sin(\theta'_{ik})$ o, de manera equivalente, la probabilidad de tener dos teselas alrededor de un vértice con ángulos θ'_{ij} y θ'_{ik} es igual a $\sin(\theta'_{ij}) \sin(\theta'_{ik}) = \sin(\arccos(1 - \bar{a}_1^2/2)) \sin(\arccos(1 - \bar{a}_2^2/2))$.

Por lo anterior, una segunda aproximación a la densidad de probabilidad de la distancia al vecino más cercano de un sitio arbitrario de alguna red cuasiperiódica, considerando el caso en el que cualquier sitio es compartido por $v = 2$ teselas, es

$$\rho_2(\bar{a}) \approx A \sin\left(\arccos\left(\frac{2 - \bar{a}^2}{2}\right)\right) \int_{\bar{a}}^2 \sin\left(\arccos\left(\frac{2 - x^2}{2}\right)\right) dx, \quad (5.9)$$

donde

$$A = \frac{1}{\int_0^2 \int_{\bar{a}}^2 \sin(\arccos(1 - \bar{a}^2/2)) \sin(\arccos(1 - x^2/2)) dx d\bar{a}},$$

es la constante de normalización.

Aplicar este mismo argumento para el caso en el que $v \geq 3$ no es tan directo pues, contrario a lo que ocurre en el caso de $v = 2$, los distintos ángulos $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$ no son todos independientes, lo cual se ve reflejado en el hecho de que tres o más teselas, elegidas aleatoriamente, no siempre serán compatibles, pudiendo solaparse o dejar huecos al momento de imponer la condición de que compartan un vértice. Sin embargo, debido a que los casos donde $\theta_1 \approx 0$ y $\theta_2 \approx 0$ son demasiado improbables, podemos aproximar la densidad de probabilidad para $v = 3$ asumiendo que las teselas son independientes, de modo que

$$\rho_3(\bar{a}) \approx A \sin\left(\arccos\left(\frac{2 - \bar{a}^2}{2}\right)\right) \left[\int_{\bar{a}}^2 \sin\left(\arccos\left(\frac{2 - x^2}{2}\right)\right) dx \right]^2, \quad (5.10)$$

donde la constante de normalización está dada por

$$A = \frac{1}{\int_0^2 \sin(\arccos(1 - \bar{a}^2/2)) \left(\int_{\bar{a}}^2 \sin(\arccos(1 - x^2/2)) dx \right)^2 d\bar{a}}.$$

Nótese que para valores de $\bar{a}$ cercanos a cero, donde al menos una de las teselas posee un ángulo interno $\theta' \approx 0$, la probabilidad de que tres teselas seleccionadas al azar se solapen no es despreciable, de tal forma que $\rho_2(\bar{a})$ puede ser una mejor aproximación que $\rho_3(\bar{a})$. Para el resto de valores de $\bar{a}$, la aproximación $\rho_3(\bar{a})$ generará una mejor aproximación con respecto a los casos anteriores. En particular, la proporción de vecinos más cercanos a una distancia igual a 1 estará mejor aproximada por $\int_1^2 \rho_3(\bar{a}) d\bar{a} \approx 0.274$ que por $\int_1^2 \rho_2(\bar{a}) d\bar{a} \approx 0.4223$.

Por último, debido a que la distancia al vecino más cercano d está determinada por $d = \min(1, \bar{a}_1, \bar{a}_2, \dots, \bar{a}_v)$, podemos aproximar la distribución de frecuencias usando $d \sim \min(1, \bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3)$ obteniendo

$$\rho(d) \approx \begin{cases} A \sin\left(\arccos\left(\frac{2-d^2}{2}\right)\right) \left[\int_d^2 \sin\left(\arccos\left(\frac{2-x^2}{2}\right)\right) dx \right]^2 & \text{si } d < 1, \\ \delta(d-1) \int_1^2 \rho_3(x) dx & \text{si } d \geq 1, \end{cases} \quad (5.11)$$

donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac.

En este punto merece la pena mencionar que las siguientes mejoras a la aproximación de la densidad de probabilidad de la distancia al vecino más cercano considerando valores de $v > 3$ representa una tarea bastante complicada. En primer lugar, necesitaríamos calcular la probabilidad $p_n(\bar{a})$ de tener exactamente n teselas alrededor de un vértice como función de la longitud de la diagonal más corta que pasa por dicho vértice. Una vez obtenidas dichas probabilidades, la densidad de probabilidad estaría aproximada por la función

$$\rho_n(\bar{a}) = \sum_{i=1}^n p_i(\bar{a}) A_i \sin \left(\arccos \left(\frac{2 - \bar{a}^2}{2} \right) \right) \left[\int_{\bar{a}}^2 \sin \left(\arccos \left(\frac{2 - x^2}{2} \right) \right) dx \right]^{i-1},$$

para valores de $n > 3$. No obstante, este cálculo queda fuera del alcance de la presente tesis, debido principalmente a que los resultados numéricos muestran un excelente ajuste a la aproximación obtenida en la función 5.11 como se muestra a continuación.

Para construir de manera numérica la distribución de la distancia al vecino más cercano hemos analizado un total de 1×10^6 sitios de cada una de las redes cuasiperiódicas de simetría rotacional $N = 5, 7, 9, 11, 13, 15, 75, 307, 467, 643$ y 1009. El algoritmo para obtener los datos de estas distribuciones es el siguiente:

1. Un punto arbitrario $\vec{P}$ en el plano es seleccionado con una probabilidad uniforme dentro de una región cuadrada de lado 2×10^6 centrada en el origen.
2. Se produce una región circular de radio R del teselado cuasiperiódico de simetría rotacional N centrada en el punto $\vec{P}$ a partir de nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ basado en el método dual generalizado. El valor numérico de R depende de la simetría rotacional del sistema y del parámetro β de nuestro algoritmo (véase la sección 4.3). Los valores α_i (véase las ecuaciones 5.1) fueron fijados al valor 0.2 para todos los casos.
3. Se define una región circular de radio $R_s = 0.7R$ centrada en el punto $\vec{P}$. Los sitios de la red cuasiperiódica que se toman en cuenta para construir la distribución de la distancia al vecino más cercano son aquellos que se encuentran dentro de estas regiones circulares, esto con el objetivo de evitar sitios correspondientes a las teselas que constituyen la frontera de la región circular de radio R del paso anterior, los cuales pueden no tener a todos sus vecinos.
4. Se produce el teselado de Voronoi asociado a todos los sitios de la red cuasiperiódica dentro de la región circular de radio R a través del algoritmo de Fortune [80]. A partir del teselado de Voronoi, se obtiene la lista de los vecinos más cercanos a cada uno de los sitios de la red cuasiperiódica que caen dentro de la región circular de radio R_s .
5. Se calcula la distancia entre cada uno de los sitios de la red cuasiperiódica y sus primeros vecinos, manteniendo el menor de dichos valores. Este valor corresponde a la distancia al vecino más cercano d .

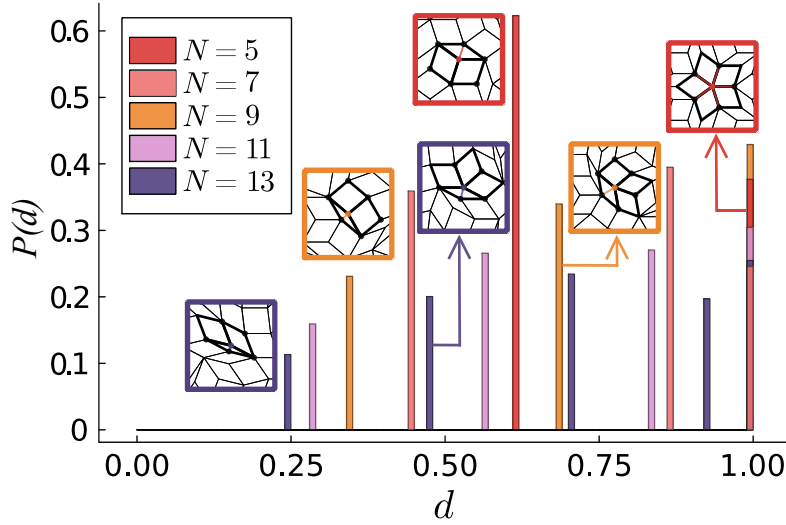


Figura 5.8: Probabilidad de encontrar un sitio cuyo vecino más cercano esté a una distancia d para redes cuasiperiódicas de simetría rotacional $N = 5, 7, 9, 11$ y 13 . Las figuras enmarcadas en cuadrados dentro de la gráfica corresponden a ejemplos sobre la distribución espacial genérica que tienen las teselas que comparten a un vértice cuya distancia al vecino más cercano es d .

6. Se iteran los pasos anteriores hasta que se alcance un total de 1×10^6 sitios analizados.

Para simetrías rotacionales bajas, la distribución de la distancia al vecino más cercano está conformada únicamente por unos cuantos valores característicos para cada valor de N , véase la figura 5.8, en donde se muestran las probabilidades de que un sitio arbitrario de las redes cuasiperiódicas esté a una distancia d de su primer vecino, además hemos incluido algunos ejemplos sobre la distribución espacial de las teselas que comparten un vértice cuya distancia al vecino más cercano es d . Por ejemplo, para $N = 5$, el vecino más cercano de cualquier sitio de la red cuasiperiódica está localizado a una distancia de 1 o bien, a una distancia de $1/\tau \approx 0.618$, que corresponde al eje menor de una tesela “delgada”, por lo que en la figura 5.8 podemos observar que su histograma posee únicamente dos barras.

Para simetrías rotacionales altas, $N \gg 5$, observamos una distribución bimodal en la distancia al vecino más cercano, con un pico bastante pronunciado en la distancia $d = 1$ y una distribución de picos de menor tamaño para todas las distancias restantes $d < 1$, la cual se vuelve densa en el límite $N \rightarrow \infty$. La distribución límite de la densidad de probabilidad de la distancia al vecino más cercano para $N \rightarrow \infty$ está aproximada por la función 5.11, véase la línea discontinua en color azul de la figura 5.9(a). Algunos ejemplos de esta densidad de probabilidad para las distancias $d < 1$ se muestran en la figura 5.9(b). El hecho de que la densidad de probabilidad para distancias $d < 1$ alcance su máximo alrededor del valor $d = \sqrt{2}/2$ se corresponde con la presencia de una tesela cuyo ángulo menor interno es cercano a $\pi/4$ radianes.

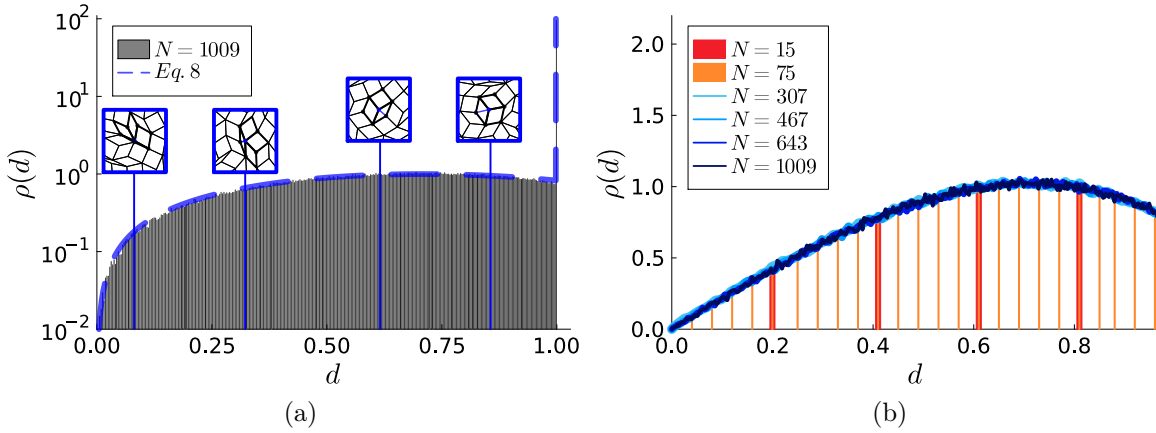


Figura 5.9: (a) Densidad de probabilidad de la distancia al vecino más cercano para una red cuasiperiódica de simetría rotacional $N = 1009$. La línea discontinua azul corresponde a la función 5.11. (b) Densidad de probabilidad de la distancia al vecino más cercano para distancias $d < 1$. Para los casos $N = 15$ y $N = 75$, se presentan las barras correspondientes a los distintos valores de d , mientras que para los casos $N > 75$ se presenta una curva continua para facilitar la visualización.

Como se puede apreciar en el pico correspondiente a $d = 1$ en la gráfica 5.9(a), hay una frecuencia de aparición de la distancia al vecino más cercano $d = 1$ mucho mayor con respecto a cualquier otro valor $d < 1$. Esta frecuencia de aparición parece converger al valor 0.277 conforme $N \rightarrow \infty$, como se observa en la gráfica 5.10. Este valor se aproxima bastante a nuestra predicción $\int_1^2 \rho(\bar{a}) d\bar{a} \approx 0.274$ a partir de la expresión 5.11. La gráfica contenida en 5.10 muestra un comportamiento oscilatorio de periodo 6 en la probabilidad p como función de N que se amortigua a medida que N crece; este comportamiento oscilatorio se mantiene como una pregunta abierta.

5.2.2. Distribución del área de Voronoi

Los resultados obtenidos en la sección anterior señalan tres puntos interesantes: (i) parece que no existe correlación entre los diferentes tipos de teselas que comparten un mismo vértice en un teselado cuasiperiódico de simetría rotacional alta, (ii) existe una distribución no constante y bien definida para las distancias $d < 1$ al vecino más cercano de los sitios de una red cuasiperiódica en el límite de altas simetrías y (iii) la proporción de aparición de la distancia $d = 1$ con respecto a los valores $d < 1$ tiende a un valor aproximado de 0.277 conforme $N \rightarrow \infty$.

El punto (i) es inesperado debido al hecho de que para simetrías rotacionales bajas, dependiendo de la clase de isomorfismo local que presente el teselado cuasiperiódico, existen configuraciones de teselas alrededor de un vértice que están prohibidas [97]. Con respecto al punto (iii), si el ángulo interno menor de las teselas que comparten un vértice $\vec{v}$ supera el valor de $\pi/3$ radianes (teselas “gordas”), la distancia al vecino más cercano asociada a dicho vértice será $d = 1$; en este sentido, aproximadamente

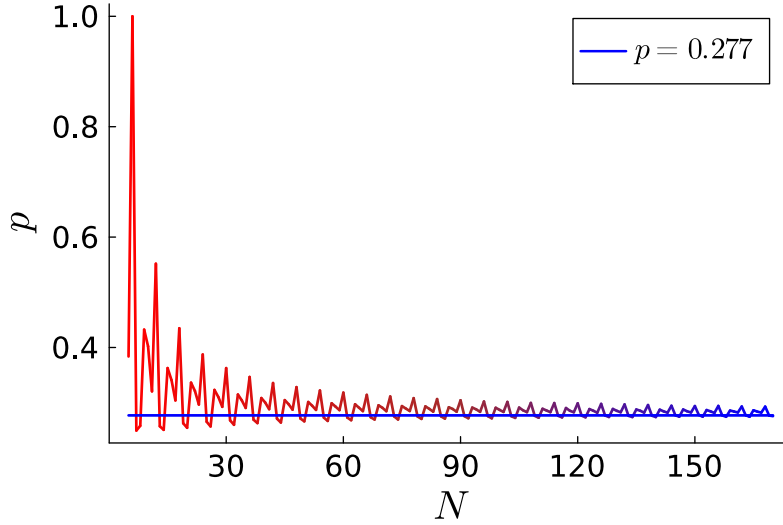


Figura 5.10: Probabilidad p de que la distancia al vecino más cercano de un sitio arbitrario en alguna red cuasiperiódica de simetría rotacional N sea exactamente $d = 1$. La línea horizontal azul representa el valor límite de 0.277 cuando $N \rightarrow \infty$.

el 27.7% de todos los vértices están rodeados por teselas “gordas” y/o forman parte de los ejes mayores de algunas teselas delgadas. Lo anterior es relevante ya que, pese a que al incrementar el valor de N se pueden producir vecinos tan cercanos entre sí como se desee, la proporción de sitios “aislados” de sus vecinos se mantiene constante. Para entender de mejor manera cómo estos sitios “aislados” se distribuyen en el sistema cuasiperiódico hemos calculado la distribución del área de las celdas de Voronoi generadas por la red cuasiperiódica. El algoritmo para producir esta distribución es el mismo que el indicado en 5.2.1 para calcular la distribución de la distancia al vecino más cercano, con una pequeña modificación a los pasos 4 y 5, omitiendo la obtención de la lista de primeros vecinos de cada celda de Voronoi y cambiando el cálculo de la distancia entre cada sitio y sus vecinos por el cálculo del área de cada celda de Voronoi.

Similar a lo observado en la sección anterior al estudiar la distribución de la distancia al vecino más cercano, la distribución del área de las celdas de Voronoi para simetrías rotacionales bajas no muestra tendencia alguna, véase la figura 5.11(a), es hasta que la simetría rotacional N toma valores mucho mayores a 5, que se comienza a hacer presente una distribución bimodal con un mínimo local alrededor del valor $A \approx 0.87$, véase la figura 5.11(c) y 5.11(e).

Este comportamiento probablemente esté relacionado con el hecho de que existen dos tipos de primeros vecinos, aquellos que se encuentran a una distancia $d = 1$ y aquellos que se encuentran a una distancia $d < 1$. El área de las celdas de Voronoi asociadas a aquellos sitios de la red con su vecino más cercano a una distancia $d = 1$ está acotada por $A \in (\pi/4, 1]$, donde la cota superior corresponde al caso en el que el sitio está rodeado por 4 teselas cuadradas, mientras que la cota inferior se corresponde con el caso límite en el que el sitio está rodeado por “teselas” que se han degenerado a líneas rectas, por lo que su eje menor tiene longitud cero. En contraste, el área de

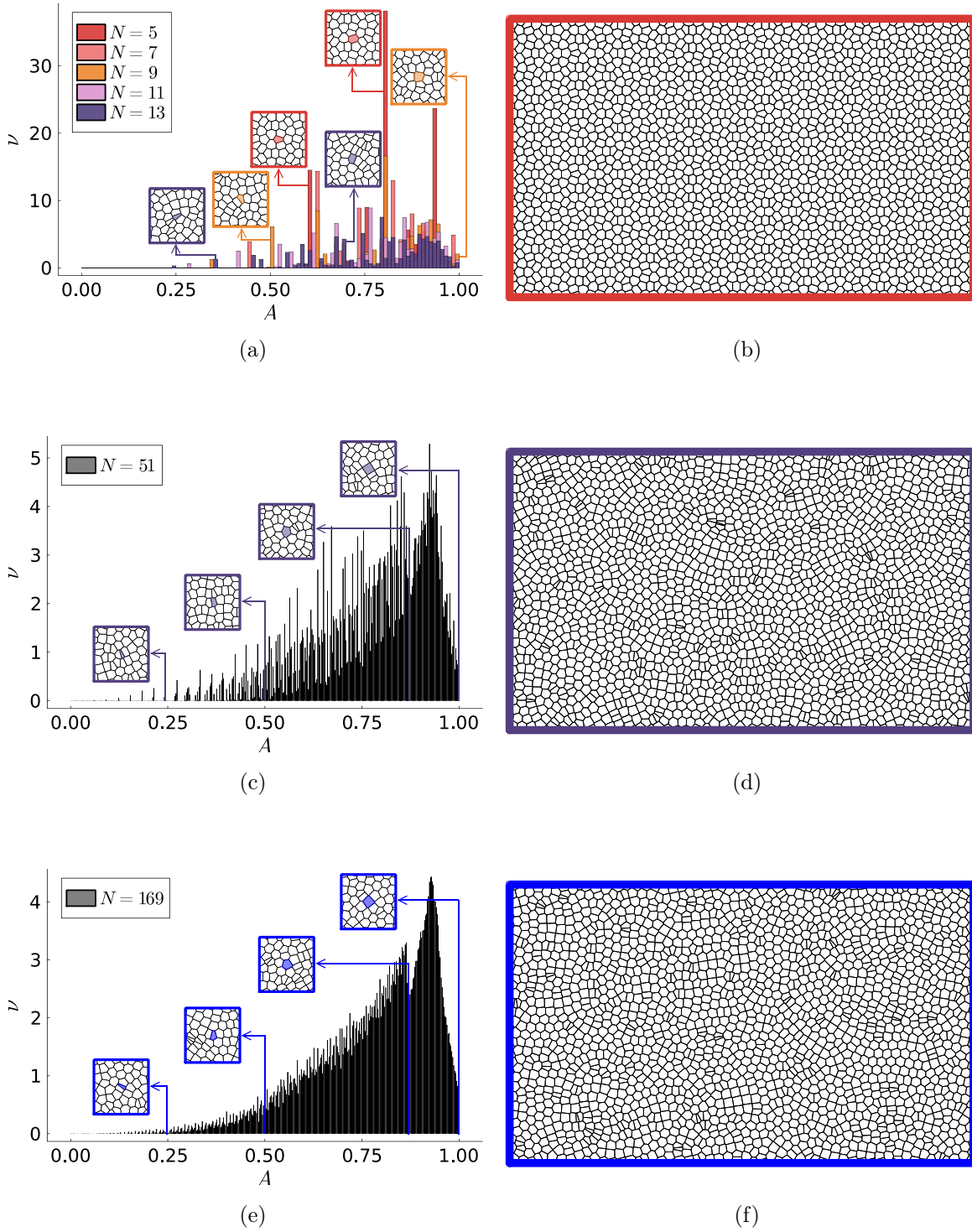


Figura 5.11: Distribución del área de las celdas de Voronoi asociadas a los sitios de las redes cuasiperiódicas de simetría rotacional $N = 5, 7, 9, 11$ y 13 (a), $N = 51$ (c) y $N = 169$ (e). En la columna de la derecha se muestran ejemplos de los teselados de Voronoi para los casos $N = 5$ (b), $N = 51$ (d) y $N = 169$ (f).

las celdas de Voronoi asociadas a aquellos sitios de la red con su vecino más cercano a una distancia $d < 1$ está acotada por $A \in (0, \sqrt{3/4}) \approx (0, 0.87)$, donde la cota inferior se corresponde con el caso en el que el sitio está rodeado únicamente por dos “teselas” que se han degenerado a líneas rectas, mientras que la cota superior corresponde al caso en el que el sitio está rodeado por tres teselas cuyo eje menor tiene longitud unitaria. Las gráficas 5.11(b), (d) y (f) muestran un ejemplo genérico del teselado de Voronoi para las redes cuasiperiódicas con simetría rotacional $N = 5$, $N = 51$ y $N = 169$, respectivamente.

5.3. Análisis estructural global en cuasicristales

Tanto los resultados obtenidos al estudiar la distribución de la longitud de vuelos libres en el límite de Boltzmann-Grad como los correspondientes a la distribución de la distancia al vecino más cercano nos sugieren que, dentro de alguna vecindad finita, los sistemas cuasiperiódicos de altas simetrías rotacionales son indistinguibles de un sistema desordenado. Esta sugerencia se ve reforzada al observar a simple vista una vecindad local, lejos del centro de simetría global, de cualquier teselado cuasiperiódico con simetría rotacional $N \gg 5$, donde la distribución espacial de las teselas parece ser completamente aleatoria (véase la figura 5.5).

Con el objetivo de corroborar la validez de dicha hipótesis, así como de determinar el tamaño de la vecindad local donde el sistema cuasiperiódico es indistinguible de un sistema desordenado (en caso de que la hipótesis sea válida), hemos estudiado la varianza en el número de sitios de las redes cuasiperiódicas que caen dentro de una ventana circular como función del radio de dicho círculo. La forma funcional en la que se presentan estas varianzas está relacionada con qué tan uniforme es la distribución espacial de los sitios, idea que se formaliza bajo el concepto de hiperuniformidad.

5.3.1. Hiperuniformidad

Decimos que un sistema conformado por múltiples partículas, definido en $\mathbb{R}^d$ para alguna $d \in \mathbb{Z}^+$, es hiperuniforme si las fluctuaciones en su densidad son completamente suprimidas a escalas de longitud muy grandes, lo cual implica que su factor de estructura $S(k)$ (con k el número de onda asociado al sistema) tiende a cero en el límite $|k| \rightarrow 0$ [94]. Este concepto proporciona un marco general para clasificar y caracterizar cristales, cuasicristales y algunos sistemas desordenados [98].

Entre los sistemas hiperuniformes se encuentran todos los sistemas periódicos, así como múltiples sistemas cuasiperiódicos [94]. Dentro de esta última categoría tenemos algunos ejemplos de sistemas cuasiperiódicos unidimensionales construidos a partir del método de corte y proyección [99] así como un conjunto de patrones cuasiperiódicos de puntos obtenidos por el método de inflación-deflación [100]. Pensando en la presencia de un orden orientacional de largo alcance en los sistemas cuasiperiódicos bidimensionales de simetría rotacional N , es plausible suponer que todos los cuasicristales perfectos también son hiperuniformes, no obstante, hasta donde nuestra revisión bibliográfica nos permite conocer, sólo unos cuantos cuasicristales en dos dimensiones

han sido estudiados bajo este concepto. De manera numérica se ha demostrado que los cuasicristales con simetría rotacional $N = 5$ (así como sus diferentes clases de isomorfismo) son hiperuniformes [97, 101], obteniéndose la misma conclusión para el caso de simetría octogonal [101].

Pensando en el caso bidimensional, los sistemas hiperuniformes están caracterizados por poseer una varianza del número de sitios contenidos en una ventana circular, $\sigma^2(R) \equiv \langle N(R)^2 \rangle - \langle N(R) \rangle^2$ con $N(R)$ el número de sitios, que crece como el perímetro de dicha superficie, es decir $\sigma^2(R) \sim R$; para el caso típico de los sistemas desordenados, esta varianza crece como el área de la superficie, $\sigma^2(R) \sim R^2$ [94]. En general, la varianza en los sistemas hiperuniformes en dos dimensiones puede ser expresada como $\sigma^2(R) = \Lambda_\infty(R)R + O(R)$, donde $\Lambda_\infty(R)$ es una función acotada que fluctúa alrededor de un valor promedio y $O(R)$ denota los términos de orden menor a R [97].

Para calcular numéricamente la varianza en el número de partículas dentro de una región circular de radio R en nuestros sistemas cuasiperiódicos, hemos implementado el siguiente algoritmo:

1. Se selecciona, con una probabilidad uniforme, un punto arbitrario $\vec{P} \in \mathbb{R}^2$ dentro de una región cuadrada de lado 2×10^6 centrada en el origen.
2. Se produce una región circular de radio $R_T = 500$ del teselado cuasiperiódico a estudiar centrada en el punto $\vec{P}$ a partir de nuestro algoritmo $g(\vec{P})$ basado en el método dual generalizado. Los valores α_i (véase las ecuaciones 4.8) fueron fijados al valor 0.2 para todos los casos.
3. Las teselas producidas en el paso anterior se decoran dependiendo del caso a analizar. Algunos de los diferentes decorados empleados en el presente trabajo fueron: Un punto por cada vértice de todas las teselas, un punto en el centroide de todas las teselas, un punto en el centroide de las teselas de menor área, etc.
4. El conjunto de puntos obtenidos tras la decoración de las teselas ($\{\vec{P}_D\}$) es ordenado, de menor a mayor distancia, con respecto al centro de la región circular $\vec{P}$.
5. Se define una región circular $C(R)$ centrada en $\vec{P}$ de radio $R = 0.005$.
6. Se cuenta el número de elementos del conjunto $\{\vec{P}_D\}$ que caen dentro de $C(R)$ y se almacena dicho valor en un arreglo $\mathbf{N}(R)$.
7. El radio de la región circular $C(R)$ se incrementa, $R \rightarrow R + \Delta R$, con $\Delta R = 0.005$.
8. Se iteran los pasos 6 y 7 hasta llegar al valor $R = R_T$.
9. Se iteran los pasos del 1 al 8 un total de 1×10^4 veces para obtener una muestra estadística del sistema cuasiperiódico.
10. Se promedian todos los arreglos $\mathbf{N}(\mathbf{R})$ y se calcula el arreglo $\mathbf{N}^2(\mathbf{R})$ definido como el promedio del cuadrado de los arreglos $\mathbf{N}(\mathbf{R})$.

11. Se calcula $\sigma^2(R) = \mathbf{N}^2(\mathbf{R}) - (\mathbf{N}(\mathbf{R}))^2$.
12. Se escala el tamaño de los radios por un factor $F_E = 2\sqrt{\pi\rho}$ siendo $\rho = N(R_T)/(\pi R_T^2)$ la densidad de puntos del sistema cuasiperiódico. Este escalamiento es necesario para mantener constante la densidad de todos los sistemas cuasiperiódicos [102].

Decorado en vértices

La primera de las decoraciones que hemos analizado corresponde a colocar un punto por cada vértice de las teselas de nuestros sistemas. Hemos calculado la varianza $\sigma^2(R)$ para sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional impar N con $N \in [5, 31]$. En la figura 5.12 se muestran las gráficas de $\sigma^2(R)/R$ para los casos $N = 5, 15$ y 31 , con su respectivo parámetro Λ_∞ , mientras que en la gráfica 5.13 se muestra la relación que existe entre Λ_∞ como función de la simetría rotacional N . Los valores de los parámetros Λ_∞ están contenidos en la tabla 5.2. Reportamos que todos los sistemas cuasiperiódicos aquí estudiados son sistemas hiperuniformes al cumplir con la relación $\sigma^2(R) = \Lambda_\infty R + O(R)$.

N	Λ_∞	N	Λ_∞
5	0.148550	19	0.538099
7	0.206372	21	0.560993
9	0.205032	23	0.694849
11	0.288182	25	0.780302
13	0.349506	27	0.797848
15	0.351440	29	0.936224
17	0.462932	31	1.046886

Tabla 5.2: Valores del parámetro Λ_∞ para los diferentes sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional N con un decorado en los vértices de las teselas.

Para validar el uso de nuestro algoritmo en el cálculo de la varianza $\sigma^2(R)$ hemos comparado la gráfica de $\sigma^2(R)$ y el valor de Λ_∞ obtenidos para el caso particular de $N = 5$ con los presentados en el artículo de Lin, Steinhardt y Torquato [97]. Nuestros resultados son consistentes con los ahí reportados.

Observamos de las gráficas correspondientes a $N = 15$ y $N = 31$ contenidas en 5.12 la presencia de un comportamiento oscilatorio con algún periodo $\lambda_s(N)$, este mismo comportamiento está presente en todos los casos (aunque si la simetría rotacional N es muy pequeña, el periodo asociado puede ser muy pequeño y no apreciarse correctamente, como en el caso de $N = 5$). Lo anterior nos indica que las fluctuaciones del sistema alcanzan un mínimo si R es un múltiplo entero de $\lambda_s(N)$; en otras palabras, $\lambda_s(N)$ define una escala de longitud para la cual las variaciones en el número de partículas son mínimas. Para obtener los diferentes valores de $\lambda_s(N)$ hemos aplicado una transformada de Fourier a la función $\sigma^2(R)/R$, definiendo a $\lambda_s(N) = 1/k_{max}$, siendo k_{max} el valor en el cual la transformada de Fourier alcanza su máximo global, véase la gráfica 5.14. La tabla 5.3 muestra los valores de $\lambda_s(N)$ para todas las simetrías

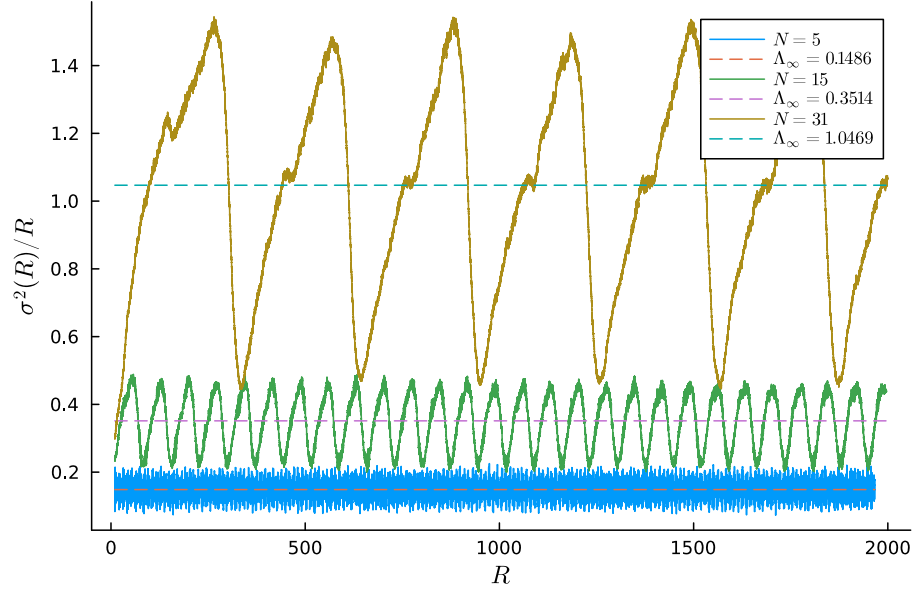


Figura 5.12: Varianza $\sigma^2(R)$ en el número de partículas dentro de una región circular de radio R como función de dicho radio para el caso de un decorado en los vértices de las teselas. Las líneas continuas corresponden a los datos de $\sigma^2(R)/R$, mientras que las líneas intermitentes corresponden al valor de Λ_∞ que mejor ajusta a los datos.

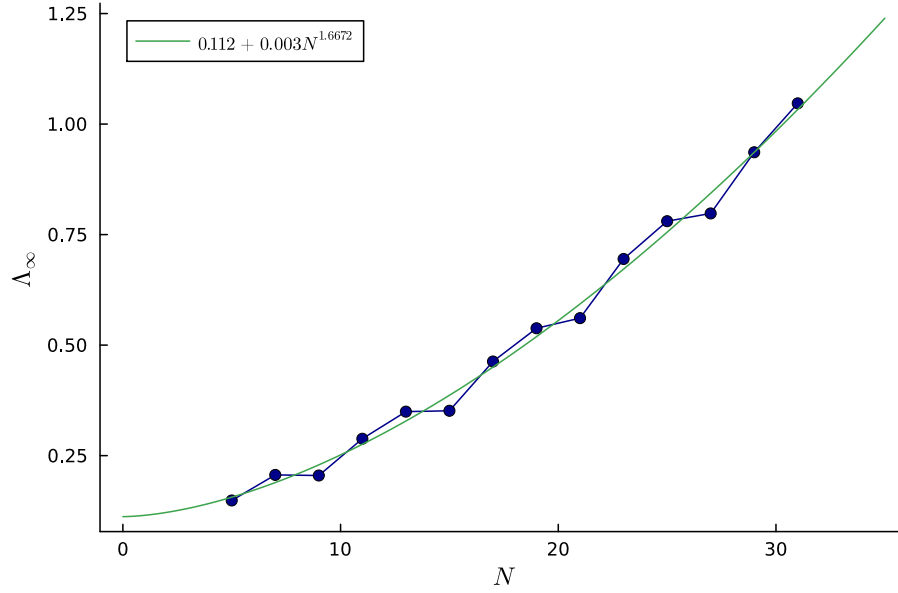


Figura 5.13: Parámetro Λ_∞ como función de la simetría rotacional N de los sistemas cuasiperiódicos con un decorado en los vértices de las teselas.

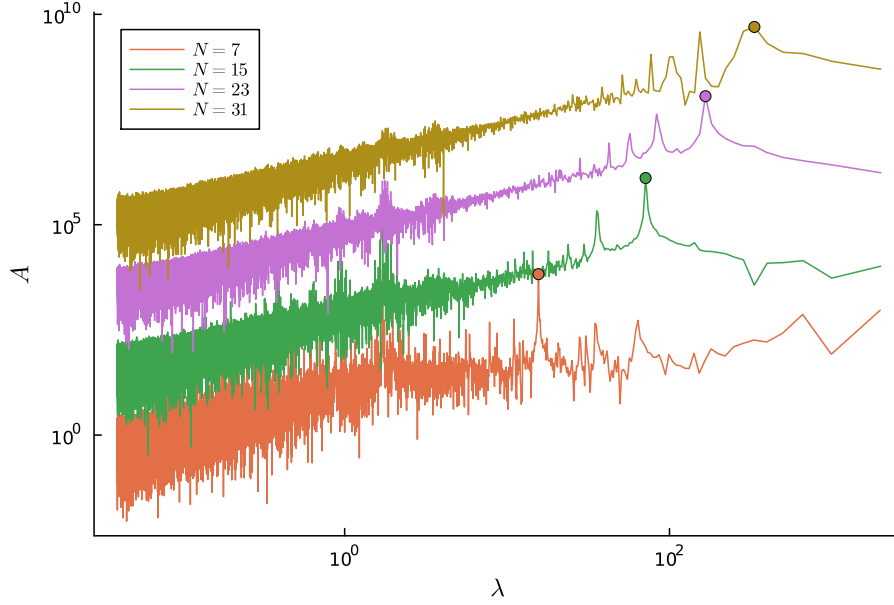


Figura 5.14: Transformada de Fourier de la función $\sigma^2(R)/R$ para los casos de un decorado en los vértices de las teselas. En cada gráfica se ha señalado con un punto el máximo global de la función que determina el valor de $\lambda_s(N)$. Para facilitar la visualización, las gráficas están desplazadas verticalmente.

analizadas, mientras que en la figura 5.15 se presenta de manera gráfica esta relación, comparándola con la función $\frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$.

N	λ_s	N	λ_s
5	—	19	117.5129
7	15.6148	21	142.7238
9	25.8415	23	166.537
11	38.3304	25	199.8683
13	53.9222	27	222.0968
15	71.2978	29	285.5745
17	90.7795	31	333.1907

Tabla 5.3: Valores del parámetro λ_s para los diferentes sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional N con un decorado en los vértices de las teselas. El caso de $N = 5$ es demasiado ruidoso para obtener un valor fiable de λ_s .

Podemos observar del ajuste presentado en 5.15 que la función $\frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$ describe bastante bien el comportamiento del parámetro $\lambda_s(N)$, donde el peor ajuste se da para los casos con $N = 27, 29$ y 31 , discrepancias que pudieran deberse al tamaño del radio máximo R_T empleado en el cálculo de $\mathbf{N}(\mathbf{R})$ puesto que el número de ciclos que completa la función $\sigma^2(R)/R$ va disminuyendo conforme la simetría rotacional aumenta. En la figura 5.16 se muestran las gráficas de $\sigma^2(R)/R$ para $N = 15$ y $N = 31$, indicando a través de líneas intermitentes en color rojo los distintos múltiplos de $\lambda_s(N)$

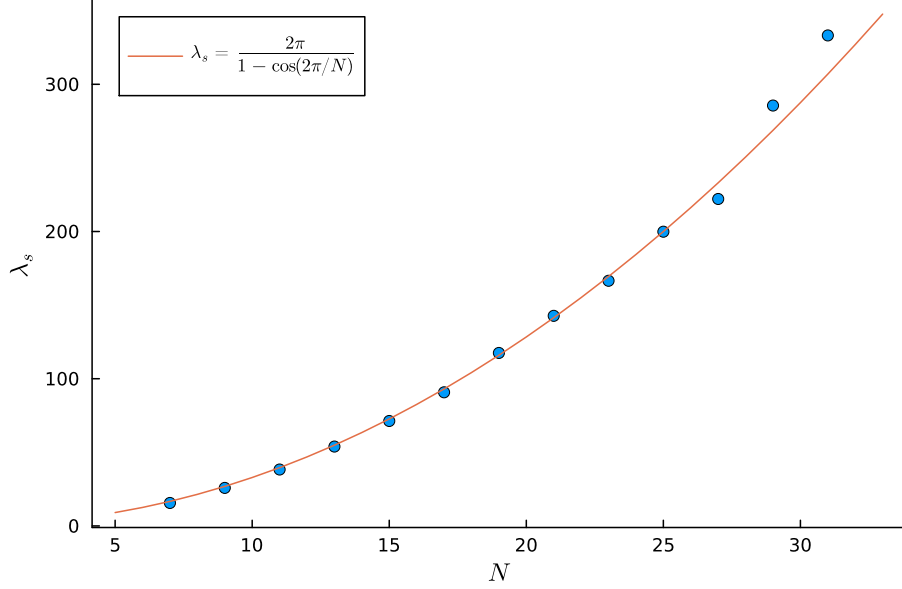


Figura 5.15: Parámetro $\lambda_s(N)$ como función de la simetría rotacional N del sistema cuasiperiódico con un decorado en los vértices de las teselas. Se muestra el ajuste entre los datos simulados y la curva $\frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$.

calculados a partir de la función $\frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$. Se observa que el ajuste es bastante bueno.

Decorado en centroides

La segunda de las decoraciones que analizamos se corresponde a colocar un punto en el centroide de cada una de las teselas de nuestros sistemas. Una vez más hemos calculado la varianza $\sigma^2(R)$ para sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional impar N , en esta ocasión considerando a $N \in [5, 23]$. En la figura 5.17 se muestran las gráficas de $\sigma^2(R)/R$ para los casos $N = 5, 15$ y 23 , con su respectivo parámetro Λ_∞ , mientras que en la gráfica 5.18 se muestra la relación que existe entre Λ_∞ como función de la simetría rotacional N . Los valores de los parámetros Λ_∞ están contenidos en la tabla 5.4. Reportamos que todos los sistemas cuasiperiódicos aquí estudiados son sistemas hiperuniformes al cumplir con la relación $\sigma^2(R) = \Lambda_\infty(R)R + O(R)$.

N	Λ_∞	N	Λ_∞
5	0.151895	15	0.342967
7	0.200393	17	0.453697
9	0.194694	19	0.529176
11	0.278937	21	0.548171
13	0.340331	23	0.688013

Tabla 5.4: Valores del parámetro Λ_∞ para los diferentes sistemas cuasiperiódicos de simetría rotacional N con un decorado en los centroides de las teselas.

De las gráficas contenidas en 5.17 observamos nuevamente un comportamiento

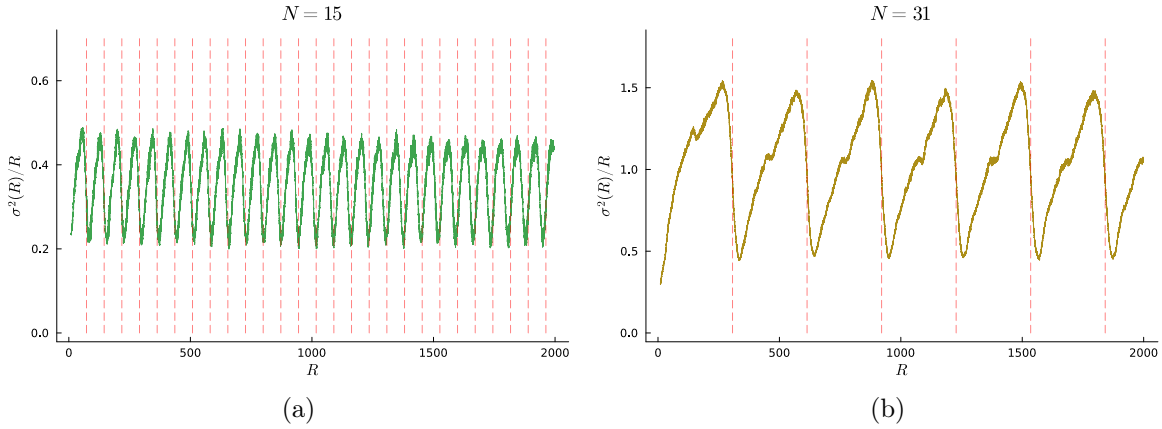


Figura 5.16: Gráficas de $\sigma^2(R)/R$ como función de R para los casos (a) $N = 15$ y (b) $N = 31$ con un decorado en los vértices de las teselas. En ambos casos se ha señalado con líneas intermitentes en color rojo los distintos múltiplos de $\lambda_s(N) = \frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$.

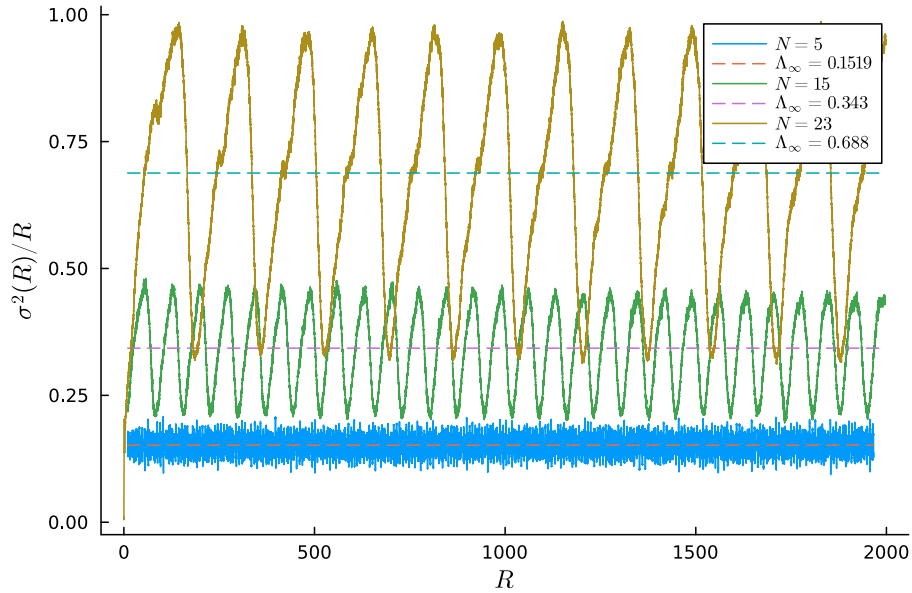


Figura 5.17: Varianza $\sigma^2(R)$ en el número de partículas dentro de una región circular de radio R como función de dicho radio para los casos con un decorado en los centroides de las teselas. Las líneas continuas corresponden a los datos de $\sigma^2(R)/R$, mientras que las líneas intermitentes corresponden al valor de Λ_∞ que mejor ajusta a los datos.

oscilatorio en $\sigma^2(R)/R$ alrededor de un valor constante para todos los casos. Este comportamiento presenta el mismo periodo $\lambda_s(N) = \frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$ que en el decorado anterior como lo señalan las gráficas contenidas en 5.19.

Una de las características que presenta el decorado en centroides que no está presente en el decorado en vértices es la capacidad de tomar en cuenta únicamente algún subconjunto de las teselas para realizar la decoración del sistema. Tomando en cuenta

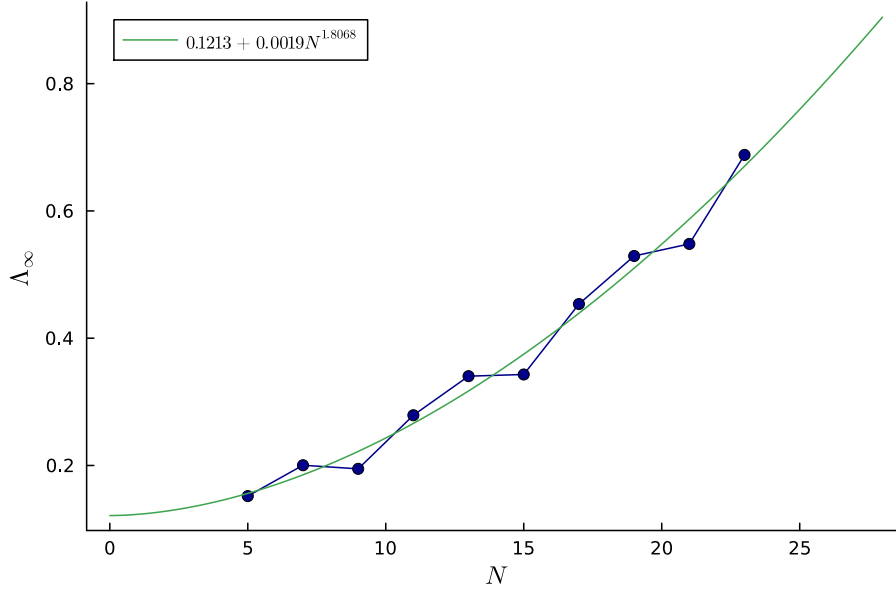


Figura 5.18: Parámetro Λ_∞ como función de la simetría rotacional N de los sistemas cuasiperiódicos con un decorados en los centroides de las teselas.

esta característica hemos calculado las varianzas $\sigma^2(R)/R$ para el caso $N = 23$ considerando los siguientes decorados: Un punto en el centroide únicamente de (a) las teselas de menor área, (b) las teselas con la segunda menor área, (c) las teselas con la tercer menor área y así sucesivamente. El caso de simetría rotacional $N = 23$ tiene 11 teselas diferentes, de las cuales en la figura 5.20 mostramos las gráficas correspondientes a las cuatro teselas de menor área. Destaca el comportamiento oscilatorio de $\sigma^2(R)/R$ en todos los subconjuntos de teselas (incluidos aquellos que no se muestran en la figura), manteniendo el mismo periodo $\lambda_s(N)$ en el caso de las teselas de menor área, pasando a tener un periodo de $\lambda_s(N)/2$ en el caso de las teselas de segunda menor área, un periodo de $\lambda_s(N)/3$ para el caso de las teselas de tercera menor área y así sucesivamente. Este comportamiento se observó de igual forma en el resto de las simetrías rotacionales impares N con $N \in [5, 23]$. Estos resultados nos sugieren que es la distribución espacial de las teselas de menor área la que determina el periodo $\lambda_s(N)$ del sistema completo.

Si bien en todos los sistemas cuasiperiódicos que hemos analizado (tanto en el decorado de los vértices como en el decorado de los centroides de las teselas) hemos encontrado que su varianza $\sigma^2(R)$ está descrita por la relación $\sigma^2(R) = \Lambda_\infty(R)R + O(R)$ para valores de R muy grandes (validando así que los sistemas son hiperuniformes de manera global), el comportamiento de esta función de manera local no es compatible con lo esperado en sistemas hiperuniformes, presentando una tendencia oscilatoria con una amplitud y periodo que tienden a crecer conforme la simetría rotacional N del sistema aumenta. Dentro de la escala espacial en la que la varianza crece, el sistema se asemeja más a un sistema desordenado que a un sistema hiperuniforme. Esta escala espacial está determinada por la magnitud $\lambda_s(N)$, siendo esta cantidad la que nos permite calcular el tamaño mínimo de una vecindad local de los sistemas

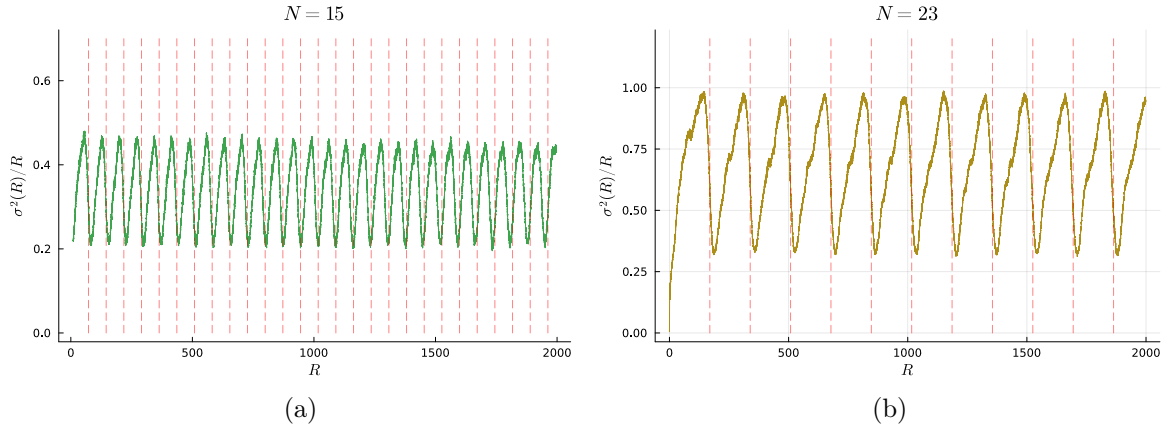


Figura 5.19: Gráficas de $\sigma^2(R)/R$ como función de R para los casos (a) $N = 15$ y (b) $N = 23$ con un decorado en los centroides de las teselas. En ambos casos se ha señalado con líneas intermitentes en color rojo los distintos múltiplos de $\lambda_s(N) = \frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$.

cuasiperiódicos necesario para observar el orden de largo alcance que los caracteriza.

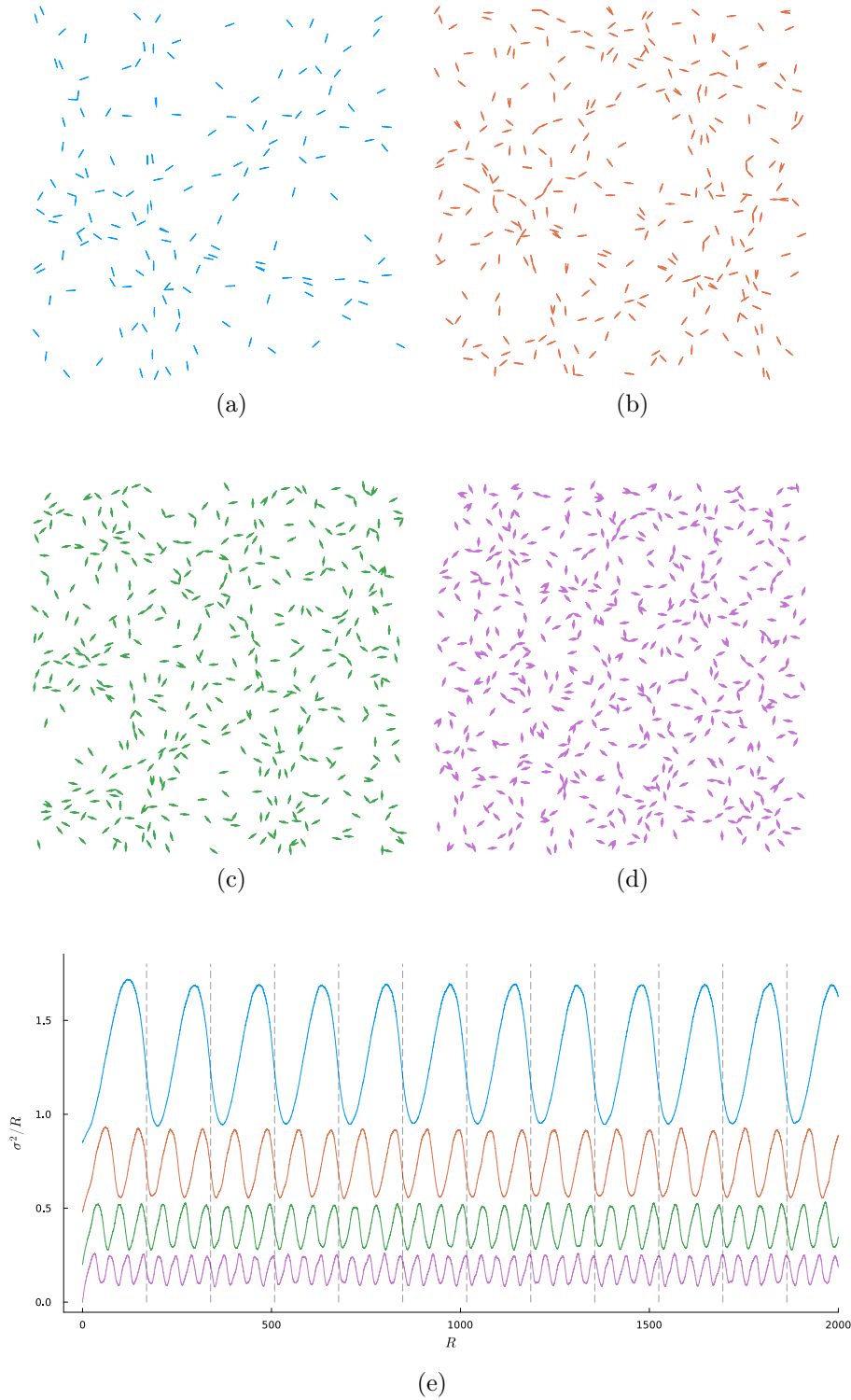


Figura 5.20: Vecindad local de un teselado cuasiperiódico de simetría rotacional $N = 23$ mostrando en color únicamente a las teselas (a) de menor área, (b) de segunda menor área, (c) de tercera menor área y (d) de cuarta menor área. En la imagen (e) se muestran las correspondientes gráficas de $\sigma^2(R)/R$ como función de R para cada uno de los casos previos, respetando la codificación en color, para un decorado en los centroides de las teselas. Estas gráficas han sido desplazadas verticalmente para facilitar su visualización.

6 Conclusiones

A lo largo de esta tesis se ha presentado desde un enfoque histórico, teórico y computacional una visión general sobre los sistemas cuasiperiódicos, la cual abarca desde las bases matemáticas de una teoría incapaz de concebirllos como una realidad física hasta los resultados obtenidos por nuestro proyecto doctoral, mismo que se ha enfocado en estudiar el comportamiento de dichos sistemas en el límite de simetrías rotacionales altas, tanto a nivel estructural como en los fenómenos de transporte que en ellos ocurren.

Con respecto a nuestros resultados, hemos validado nuestro algoritmo computacional $g(\vec{P})$ para construir vecindades locales de sistemas cuasiperiódicos con simetría rotacional N como una alternativa eficiente para calcular la distribución de la distancia de vuelos libres de una partícula neutra en gases de Lorentz cuasiperiódicos. Esta validación es presentada al replicar los resultados obtenidos por Kraemer, Schmiedeborg y Sanders [66] sobre la transición entre distintos tipos de horizontes presentes dentro de un sistema cuasiperiódico concreto.

Una vez validado el uso de nuestro algoritmo hemos calculado, a partir de argumentos geométricos así como de simulaciones computacionales, la distribución de la longitud de vuelos libres en el límite de Boltzmann-Grad para distintos gases de Lorentz cuasiperiódicos con diferentes simetrías rotacionales, observando que dichas distribuciones tienden a un comportamiento exponencial conforme el rango (no la simetría rotacional) de los sistemas aumenta. Esta tendencia a una distribución exponencial es similar a lo observado en sistemas desordenados.

En lo que concierne a la estructura local de los sistemas cuasiperiódicos, calculamos la distribución de la distancia al vecino más cercano a partir de consideraciones geométricas sobre la distribución de teselas en el espacio real de nuestro sistema y las condiciones en el espacio dual que dan lugar a estas; posteriormente comparamos dicha distribución con los datos simulados para múltiples sistemas cuasiperiódicos de diferentes simetrías rotacionales, cubriendo un intervalo desde $N = 5$ hasta $N = 1009$, encontrando un excelente ajuste entre ambas conforme la simetría rotacional aumenta. Este comportamiento nos señala la existencia de una distribución límite para estos sistemas conforme $N \rightarrow \infty$, la cual presenta un comportamiento inesperado: aproximadamente un 27.7% del total de los sitios de la red cuasiperiódica se encuentran a una distancia $d = 1$ de su vecino más cercano, mientras que el 72.3% restante poseen una distancia $d < 1$. Para los casos de simetría rotacional baja no es posible discernir estas características.

Partiendo del resultado anterior, analizamos la distribución del área de las celdas

de Voronoi como función de la simetría rotacional N de los sistemas cuasiperiódicos, encontrando una distribución bimodal con un mínimo local alrededor del valor $A \approx 0.87$ en el límite en que $N \rightarrow \infty$. Este comportamiento tampoco es discernible para los sistemas cuasiperiódicos de baja simetría rotacional.

Finalmente, hemos estudiado la varianza en el número de sitios de las redes cuasiperiódicas que caen dentro de una ventana circular como función del radio de dicho círculo. Las redes cuasiperiódicas se obtuvieron a partir de considerar diferentes decorados en las teselas de los teselados cuasiperiódicos de simetría rotacional N producidos por nuestro algoritmo $g(\vec{P})$. En todos los casos analizados encontramos un comportamiento oscilatorio en torno a un valor constante para la función $\sigma^2(R)/R$ siendo $\sigma^2(R) \equiv \langle N(R)^2 \rangle - \langle N(R) \rangle^2$ con $N(R)$ el número de sitios dentro de la ventana circular. Esto nos indica que, de manera global (para $R \gg 1$), las redes cuasiperiódicas son hiperuniformes, no obstante, el periodo $\lambda_s(N)$ y la amplitud de las oscilaciones aumentan conforme la simetría rotacional N aumenta, con lo que la magnitud $\lambda_s(N)$ define una escala de longitud que separa el comportamiento de los sistemas cuasiperiódicos en dos: un regimen local en el que el sistema cuasiperiódico se asemeja a un sistema desordenado y un regimen global donde el orden de largo alcance que caracteriza a los sistemas cuasiperiódicos se hace presente. Esta cantidad $\lambda_s(N)$ está determinada únicamente por las teselas de menor área del sistema y sigue la relación $\lambda_s(N) = \frac{2\pi}{1-\cos(2\pi/N)}$.

A partir de estos resultados es factible suponer que los sistemas cuasiperiódicos de alta simetría rotacional pueden ser usados como modelo para sistemas amorfos que compartan la misma distribución de la distancia al vecino más cercano, siempre y cuando no se consideren posibles interacciones o propiedades del sistema a largo alcance. Esto es deseable ya que, contrario a un sistema desordenado, un sistema cuasiperiódico como los estudiados en la presente tesis puede ser obtenido de manera determinista, con lo que en principio todos los grados de libertad y excitaciones del sistema son conocidos.

6.1. Trabajo a futuro

Siguiendo la misma línea de investigación presentada en esta tesis, quedan como trabajo a futuro los siguientes puntos:

- Estudiar la difusión de partículas neutras dentro de gases de Lorentz cuasiperiódicos considerando la interacción entre partículas. Para realizar esta simulación se propone definir a los obstáculos que conforman a los gases de Lorentz como esferas duras capaces de rotar sobre su propio eje, de manera que al colisionar una partícula con algún obstáculo se permita el intercambio energético entre ambos, cambiando la velocidad lineal de la partícula, así como la velocidad angular del obstáculo. Asumiendo que no hay pérdida de energía en estas colisiones, la interacción entre partículas estaría siendo mediada a través de los rotores. Este modelo nos permitiría estudiar las excitaciones térmicas de los cuasicristales, con particular interés en los fasones.

- Generalizar el algoritmo $g(\vec{P})$ basado en el método dual generalizado para aquellos sistemas en los que los vectores estrella del conjunto $\mathbf{S}$ no son simétricos ni unitarios, eliminando la restricción presente a lo largo de todo este trabajo respecto a la simetría rotacional de los sistemas cuasiperiódicos. Esta generalización nos permitiría modificar los mallados $\mathbf{G}_N$ en el espacio dual asociados a un mismo orden orientacional, lo que a su vez modificará la distribución espacial y estadística de las teselas en el espacio real de los sistemas cuasiperiódicos. Esta posibilidad resulta interesante puesto que podría habilitar el diseño de sistemas cuasiperiódicos con distribuciones de teselas específicas.
- Dando continuidad al punto anterior, otra generalización deseable al algoritmo $g(\vec{P})$ consiste en permitir separaciones no unitarias entre las rectas que conforman al mallado $\mathbf{G}_N$ en el espacio dual, incluyendo en particular aquellas funciones ξ_{n_i} que permitan espaciados cuasiperiódicos entre las rectas. Es este punto el que nos permitiría construir sistemas cuasiperiódicos que no pueden ser producidos por el método de corte y proyección.
- Generalizar los algoritmos aquí expuestos a su análogo en el caso tridimensional. Las expresiones analíticas de los vértices de las teselas que conforman a los teselados cuasiperiódicos en 2D que se expusieron en el capítulo 4 tienen su expresión análoga al caso 3D, estas expresiones juegan un papel fundamental en el desarrollo de nuestro algoritmo $g(\vec{P})$, por lo que en principio resulta posible construir un algoritmo similar que nos permita estudiar sistemas cuasiperiódicos tridimensionales.
- Por último, de acuerdo con lo expuesto al inicio del capítulo 4, una manera usual de estudiar a los sistemas cuasiperiódicos desde un enfoque experimental consiste en el uso de elementos ópticos para producir una estructura espacial cuasiperiódica a partir del haz de luz de uno o más láseres. El haz de luz resultante, ahora con una estructura espacial determinada, se hace interactuar con sistemas materiales para inducir un arreglo cuasiperiódico de los elementos de dichos sistemas. Con base en esto, resulta deseable medir de manera experimental la difusión de partículas neutras dentro de un arreglo cuasiperiódico coloidal que nos permita corroborar nuestros resultados computacionales.

6.2. Artículos publicados y participación en congresos

Como producto directo de la investigación realizada a lo largo de este proyecto doctoral, se reportan las siguientes publicaciones y participaciones en congresos:

- A. S. Kraemer and A. R. Mendoza, “Cuasicristales: de universos paralelos a sombras multidimensionales,” *Revista Digital Universitaria* 25, 3 (2024). <https://doi.org/10.22201/ceide.16076079e.2024.25.3.5>

- A. R. Mendoza, A. S. Kraemer, E. C. Oğuz, and M. Schmiedeberg, “Structural studies of local environments in high-symmetry quasicrystals,” *Scientific Reports*, vol. 13, Oct. 2023. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-42145-7>
- A. R. Mendoza and A. S. Kraemer, “Efficient algorithm for simulating particles in true quasiperiodic environments,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 55, p. 245001, May 2022. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac6b68>
- LXVI Congreso Nacional de Física (2023) Michoacán, México. Plática breve: “Análisis estructural en entornos locales de cuasicristales de alta simetría”.
- XXX International Materials Research Congress (2022) Quintana Roo, México. Plática breve: “Dynamics and structure of quasicrystals: an efficient algorithm to simulate quasiperiodic environments”.

A Teoremas sobre isometrías del plano

Las demostraciones de algunos de los teoremas presentados en el capítulo 1 son demasiado largas para ser incluidas en el cuerpo del texto principal sin que esto represente una ruptura al ritmo de exposición de las ideas que lo conforman. El propósito de dicho capítulo es brindar una introducción amigable a los lectores sobre la teoría cristalográfica clásica, propósito que se veía eclipsado por párrafos y párrafos de manipulaciones algebraicas propias de toda demostración matemática rigurosa, sin embargo, la importancia de estos resultados en el desarrollo del tema desde un punto de vista formal es alta, por lo que se ha optado por incluirlos en el presente apéndice.

Teorema A.0.1. *El conjunto de todas las isometrías del plano, $\mathbf{E}_2$, forman un grupo bajo la composición usual de funciones. A dicho grupo se le conoce como el grupo Euclideo.*

Demostración. Necesitamos mostrar que se satisfacen las propiedades de cerradura, asociatividad, la existencia de un elemento neutro y la existencia de un elemento inverso para cada elemento de nuestro conjunto. Revisemos cada una de estas propiedades.

i) Cerradura: Sean $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano y $g, h \in \mathbf{E}_2$ dos isometrías del plano arbitrarias. Aplicando la composición de funciones gh a estos dos puntos, tenemos que la distancia entre $gh(\vec{x})$ y $gh(\vec{y})$ satisface que

$$||gh(\vec{x}) - gh(\vec{y})|| = ||g(h(\vec{x})) - g(h(\vec{y}))|| = ||h(\vec{x}) - h(\vec{y})||,$$

puesto que g es una isometría del plano. Además, dado que h es también una isometría del plano, se satisface que

$$||h(\vec{x}) - h(\vec{y})|| = ||\vec{x} - \vec{y}||.$$

Por transitividad de los números reales, tenemos que

$$||gh(\vec{x}) - gh(\vec{y})|| = ||\vec{x} - \vec{y}||,$$

con lo cual concluimos que la composición gh es a su vez una isometría del plano. Es decir, $gh \in \mathbf{E}_2$.

ii) Asociatividad: La composición de funciones es una operación asociativa para cualesquiera tres funciones definidas de $\mathbb{R}^2$ a $\mathbb{R}^2$, en particular para las funciones de $\mathbf{E}_2$. Sean $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano y $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, $g : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ y

$h : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ tres funciones arbitrarias (no necesariamente isometrías del plano). Por un lado tenemos que

$$(f(gh))(\vec{x}) = f(gh(\vec{x})) = f(g(h(\vec{x}))),$$

mientras que, por otro lado se satisface que

$$((fg)h)(\vec{x}) = fg(h(\vec{x})) = f(g(h(\vec{x}))).$$

Con esto concluimos que $(f(gh))(\vec{x}) = ((fg)h)(\vec{x})$ para cualquier $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$, con lo que se cumple que $f(gh) = (fg)h$, demostrando la asociatividad de la composición de funciones en general.

iii) Existencia del elemento neutro: Sea $I : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ la función identidad en el plano que se define como $I(\vec{x}) = \vec{x}$ para todo $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$. Sean $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano y sea $g \in \mathbf{E}_2$ una isometría del plano arbitraria.

Primero, demostremos que I es una isometría del plano. Por la definición de I al actuar sobre cualquier punto en el plano, tenemos que

$$\|I(\vec{x}) - I(\vec{y})\| = \|\vec{x} - \vec{y}\|,$$

la cual es la condición necesaria y suficiente para ser considerada una isometría del plano, por lo que $I \in \mathbf{E}_2$.

Analicemos ahora el comportamiento de las composiciones Ig y gI sobre el punto arbitrario $\vec{x}$. Por un lado tenemos que

$$Ig(\vec{x}) = I(g(\vec{x})) = g(\vec{x}),$$

mientras que por otro lado tenemos que

$$gI(\vec{x}) = g(I(\vec{x})) = g(\vec{x}),$$

de modo que

$$Ig(\vec{x}) = gI(\vec{x}) = g(\vec{x}).$$

Puesto que el punto $\vec{x}$ es un punto arbitrario en el plano, se satisface que $Ig = gI = g$ para toda $g \in \mathbf{E}_2$. Como la isometría g es arbitraria, concluimos que la función $I \in \mathbf{E}_2$ es un elemento neutro del conjunto de isometrías.

Finalmente, concluyamos demostrando que I es el único elemento neutro que existe en $\mathbf{E}_2$. Para ello, supongamos que existe otro elemento neutro $N \in \mathbf{E}_2$ distinto de I . Por ser N un elemento neutro, se satisface que $Ng = gN = g$ para cualquier función $g \in \mathbf{E}_2$, en particular para $g = I$. Debido a que I es un elemento neutro, se cumple que $IN = NI = N$, mientras que, por ser N un elemento neutro, tenemos que $NI = IN = I$. Puesto que en ambos casos tenemos que $NI = I$ y $NI = N$, concluimos entonces que $N = I$, lo cual contradice la hipótesis de que N es distinto de I . Por lo tanto, I es el único elemento neutro que existe en $\mathbf{E}_2$.

iv) Existencia de un elemento inverso: Sea $g \in \mathbf{E}_2$ una isometría arbitraria del plano y sea $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano. Notemos que podemos expresar a la acción de g sobre $\vec{x}$ de la siguiente manera

$$g(\vec{x}) = g(\vec{0}) + (g(\vec{x}) - g(\vec{0})) = g(\vec{0}) + H(\vec{x}), \quad (\text{A.1})$$

donde definimos $H(\vec{x}) = g(\vec{x}) - g(\vec{0})$.

Veamos que $H(\vec{x})$ es una isometría del plano que mantiene fijo al origen y que preserva la norma de los puntos en el plano. Para ello, consideremos $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano; por definición de $H(\vec{x})$ se cumple la siguiente igualdad

$$\|H(\vec{x}) - H(\vec{y})\| = \|(g(\vec{x}) - g(\vec{0})) - (g(\vec{y}) - g(\vec{0}))\| = \|g(\vec{x}) - g(\vec{y})\|,$$

pero, como por hipótesis g es una isometría del plano, entonces se cumple que

$$\|g(\vec{x}) - g(\vec{y})\| = \|\vec{x} - \vec{y}\|,$$

con lo que podemos concluir que $H \in \mathbf{E}_2$ al satisfacer que

$$\|H(\vec{x}) - H(\vec{y})\| = \|\vec{x} - \vec{y}\|. \quad (\text{A.2})$$

La propiedad de que $H(\vec{x})$ mantiene fijo al origen se observa de la siguiente igualdad

$$H(\vec{0}) = g(\vec{0}) - g(\vec{0}) = \vec{0}, \quad (\text{A.3})$$

y, finalmente, observamos que $H(\vec{x})$ preserva la norma al satisfacer que

$$\|H(\vec{x})\| = \|g(\vec{x}) - g(\vec{0})\| = \|\vec{x} - \vec{0}\| = \|\vec{x}\|. \quad (\text{A.4})$$

Aunado a lo anterior, $H(\vec{x})$ preserva el producto interno entre dos puntos del plano, esto es $\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle = \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle$ para toda $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$. Para ver esto, consideremos la propiedad A.2 de H , así como el hecho de que la norma al cuadrado de cualquier punto puede expresarse como el producto interno de dicho punto consigo mismo; bajo estas consideraciones tenemos que

$$\begin{aligned} \|H(\vec{x}) - H(\vec{y})\| &= \|\vec{x} - \vec{y}\|, \\ \implies \|H(\vec{x}) - H(\vec{y})\|^2 &= \|\vec{x} - \vec{y}\|^2, \\ \implies \langle H(\vec{x}) - H(\vec{y}), H(\vec{x}) - H(\vec{y}) \rangle &= \langle \vec{x} - \vec{y}, \vec{x} - \vec{y} \rangle, \end{aligned}$$

por ser el producto interno un operador bilineal, al expandirlos en la igualdad anterior obtenemos la siguiente igualdad

$$\langle H(\vec{x}), H(\vec{x}) \rangle - 2\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle + \langle H(\vec{y}), H(\vec{y}) \rangle = \langle \vec{x}, \vec{x} \rangle - 2\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle + \langle \vec{y}, \vec{y} \rangle,$$

donde hemos empleado que $\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle = \langle \vec{y}, \vec{x} \rangle$ para cualesquiera par de puntos en el plano. Continuando con la manipulación algebraica de estas igualdades, tenemos que

$$\|H(\vec{x})\|^2 - 2\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle + \|H(\vec{y})\|^2 = \|\vec{x}\|^2 - 2\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle + \|\vec{y}\|^2,$$

pero como vimos anteriormente, la función $H(\vec{x})$ preserva la norma (propiedad A.4), por lo que

$$\|\vec{x}\|^2 - 2\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle + \|\vec{y}\|^2 = \|\vec{x}\|^2 - 2\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle + \|\vec{y}\|^2,$$

cancelando términos iguales y multiplicando por un factor de -2 ambos lados de la igualdad, concluimos que

$$\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle = \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle. \quad (\text{A.5})$$

A partir de estas propiedades, mostremos que la función $H(\vec{x})$ es lineal, es decir, que cumple las siguientes igualdades

$$H(\vec{x} + \vec{y}) = H(\vec{x}) + H(\vec{y}), \quad (\text{A.6})$$

$$H(\lambda\vec{x}) = \lambda H(\vec{x}), \quad (\text{A.7})$$

siendo $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano y $\lambda \in \mathbb{R}$ un número real arbitrario.

Para la primera de estas dos igualdades, consideremos la siguiente expansión algebraica

$$\begin{aligned} & \|H(\vec{x} + \vec{y}) - (H(\vec{x}) + H(\vec{y}))\|^2 = \\ & \langle H(\vec{x} + \vec{y}) - (H(\vec{x}) + H(\vec{y})), H(\vec{x} + \vec{y}) - (H(\vec{x}) + H(\vec{y})) \rangle = \\ & \langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x} + \vec{y}) \rangle - 2\langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x}) + H(\vec{y}) \rangle + \langle H(\vec{x}) + H(\vec{y}), H(\vec{x}) + H(\vec{y}) \rangle = \\ & \|H(\vec{x} + \vec{y})\|^2 - 2\langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x}) + H(\vec{y}) \rangle + (\|H(\vec{x})\|^2 + 2\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle + \|H(\vec{y})\|^2) = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 - 2\langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x}) + H(\vec{y}) \rangle + \|\vec{x}\|^2 + 2\langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle + \|\vec{y}\|^2 = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 - 2[\langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x}) + H(\vec{y}) \rangle - \langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle] = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 - 2[\langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{x}) \rangle + \langle H(\vec{x} + \vec{y}), H(\vec{y}) \rangle - \langle H(\vec{x}), H(\vec{y}) \rangle] = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 - 2[\langle \vec{x} + \vec{y}, \vec{x} \rangle + \langle \vec{x} + \vec{y}, \vec{y} \rangle - \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle] = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 - 2[\langle \vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y} \rangle - \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle] = \\ & \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 - 2\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + 2\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle = \\ & -\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x}\|^2 + 2\langle \vec{x}, \vec{y} \rangle + \|\vec{y}\|^2 = \\ & -\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \langle \vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y} \rangle = \\ & -\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 = 0, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad de $H(\vec{x})$ de preservar la norma (propiedad A.4) y el producto interno (propiedad A.5). Puesto que $\|H(\vec{x} + \vec{y}) - (H(\vec{x}) + H(\vec{y}))\|^2 = 0$, concluimos entonces que $H(\vec{x} + \vec{y}) = H(\vec{x}) + H(\vec{y})$, para todo par de puntos arbitrarios en el plano.

Para la segunda de las igualdades, sea $\lambda \in \mathbb{R}$ un número real arbitrario. Tenemos que

$$\begin{aligned} & \|H(\lambda\vec{x}) - \lambda H(\vec{x})\|^2 = \\ & \langle H(\lambda\vec{x}) - \lambda H(\vec{x}), H(\lambda\vec{x}) - \lambda H(\vec{x}) \rangle = \\ & \langle H(\lambda\vec{x}), H(\lambda\vec{x}) \rangle - 2\langle H(\lambda\vec{x}), \lambda H(\vec{x}) \rangle + \langle \lambda H(\vec{x}), \lambda H(\vec{x}) \rangle = \\ & \langle H(\lambda\vec{x}), H(\lambda\vec{x}) \rangle - 2\lambda\langle H(\lambda\vec{x}), H(\vec{x}) \rangle + \lambda^2\langle H(\vec{x}), H(\vec{x}) \rangle = \\ & \langle \lambda\vec{x}, \lambda\vec{x} \rangle - 2\lambda\langle \lambda\vec{x}, \vec{x} \rangle + \lambda^2\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle = \\ & \lambda^2\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle - 2\lambda^2\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle + \lambda^2\langle \vec{x}, \vec{x} \rangle = 0, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad de $H(\vec{x})$ de preservar el producto interno (propiedad A.5), así como la bilinealidad del producto interno. Puesto que $\|H(\lambda\vec{x}) - \lambda H(\vec{x})\|^2 = 0$, concluimos entonces que $H(\lambda\vec{x}) = \lambda H(\vec{x})$, para todo número real λ y cualquier punto $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$.

Debido a la linealidad de $H(\vec{x})$, podemos expresar esta función como la acción de una matriz $M \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$, de modo que $H(\vec{x}) = M\vec{x}$. Apliquemos la función $H(\vec{x})$ al vector unitario $\hat{e}_i$ de la base canónica de $\mathbb{R}^2$

$$H(\hat{e}_i) = M\hat{e}_i = M_i,$$

siendo M_i la i -ésima columna de la matriz M .

Puesto que la función $H(\vec{x})$ preserva el producto interno (propiedad A.5), tenemos que

$$\langle M_i, M_j \rangle = \langle H(\hat{e}_i), H(\hat{e}_j) \rangle = \langle \hat{e}_i, \hat{e}_j \rangle = \delta_{i,j},$$

siendo $\delta_{i,j}$ la delta de Kronecker. Debido a esto, tenemos que M es una matriz ortogonal, esto es

$$M^T M = M M^T = I, \tag{A.8}$$

con M^T la matriz transpuesta de M e I la matriz identidad. Esta condición A.8 que satisface la matriz M^T es la condición que satisface la matriz inversa de M , con lo que concluimos que existe la matriz inversa de M , la cual denotamos por M^{-1} , y es igual a M^T .

Regresando a la expresión A.1, podemos expresarla como

$$g(\vec{x}) = g(\vec{0}) + M\vec{x},$$

de modo que la función inversa de $g(\vec{x})$ existe, siendo esta

$$g^{-1}(\vec{x}) = M^T(\vec{x} - g(\vec{0})).$$

Una vez mostrada la existencia del elemento inverso, demostremos que este es una isometría del plano. Sean $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano, dado que $g(\vec{x})$ es una isometría del plano, se satisface que

$$\|g^{-1}(\vec{x}) - g^{-1}(\vec{y})\| = \|g(g^{-1}(\vec{x})) - g(g^{-1}(\vec{y}))\| = \|\vec{x} - \vec{y}\|,$$

con lo cual concluimos que $g^{-1}(\vec{x})$ existe y pertenece al conjunto $\mathbf{E}_2$ de las isometrías del plano.

Dado que hemos probado que se cumplen las propiedades de cerradura, asociatividad, la existencia de un elemento neutro y la existencia de un elemento inverso para cada elemento de nuestro conjunto, hemos demostrado que $\mathbf{E}_2$ es un grupo $\square$

Teorema A.0.2. *El conjunto de todas las traslaciones forman un subgrupo $\mathbf{T}$ de $\mathbf{E}_2$.*

Demostración. Mostremos en una primera instancia que una traslación arbitraria $\tau(\vec{x})$ es una isometría del plano. Para ello, sean $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en

el plano y sea $\vec{v} \in \mathbb{R}^2$ el vector que determina a la traslación τ . Así, tenemos por definición

$$\|\tau(\vec{x}) - \tau(\vec{y})\| = \|(\vec{v} + \vec{x}) - (\vec{v} + \vec{y})\| = \|\vec{x} - \vec{y}\|,$$

con lo cual observamos que $\tau \in \mathbf{E}_2$.

Asegurando que las traslaciones son isometrías del plano, tenemos entonces que el conjunto de todas las traslaciones $\mathbf{T}$ es un subconjunto de $\mathbf{E}_2$, de modo que haremos uso del denominado *criterio del subgrupo* [8] para demostrar que $\mathbf{T}$ es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$ bajo la composición usual de funciones. Este criterio nos asegura lo siguiente:

Un subconjunto no vacío $\mathbf{A}$ de un grupo $\mathbf{B}$ es un subgrupo si y sólo si para todo $a, b \in \mathbf{A}$ también se cumple que $a \cdot b^{-1} \in \mathbf{A}$, siendo $\cdot$ la operación binaria bajo la cual $\mathbf{B}$ es un grupo.

Sean $\tau_1, \tau_2 \in \mathbf{T}$ dos traslaciones arbitrarias determinadas por los vectores $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^2$, esto es

$$\tau_1(\vec{x}) = \vec{u} + \vec{x},$$

$$\tau_2(\vec{x}) = \vec{v} + \vec{x}.$$

La función inversa de τ_2 , denotada como $\tau_2^{-1}(\vec{x})$, está dada por

$$\tau_2^{-1}(\vec{x}) = \vec{x} - \vec{v}.$$

Tomando en consideración estos puntos, tenemos que

$$\tau_1\tau_2^{-1}(\vec{x}) = \tau_1(\tau_2^{-1}(\vec{x})) = \tau_1(\vec{x} - \vec{v}) = \vec{u} + (\vec{x} - \vec{v}) = (\vec{u} - \vec{v}) + \vec{x},$$

$$\implies \tau_1\tau_2^{-1}(\vec{x}) = \vec{w} + \vec{x},$$

siendo $\vec{w} = (\vec{u} - \vec{v}) \in \mathbb{R}^2$. Así, podemos concluir que la composición de traslaciones $\tau_1\tau_2^{-1}$ es una traslación determinada por el vector $\vec{w}$, con lo que concluimos que $\tau_1\tau_2^{-1} \in \mathbf{T}$, lo que a su vez demuestra que el conjunto $\mathbf{T}$ es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$. $\square$

Teorema A.0.3. *En el plano, toda matriz ortogonal corresponde a una rotación alrededor del origen o bien, a una reflexión con respecto a una recta que pasa por el origen.*

Demostración. Por definición, las matrices ortogonales $Q \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ son aquellas que cumplen la siguiente igualdad

$$Q^T Q = Q Q^T = I,$$

siendo M^T la matriz transpuesta de M e I la matriz identidad. Para el caso particular del plano podemos expresar a Q , Q^T e I de la siguiente manera

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad Q^T = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

donde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ son números reales, hasta este momento, arbitrarios. Sustituyendo estas expresiones en la igualdad que define a las matrices ortogonales tenemos que

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \implies \begin{pmatrix} a^2 + c^2 & ab + cd \\ ab + cd & b^2 + d^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & ac + bd \\ ac + bd & c^2 + d^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

de modo que tenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$a^2 + c^2 = a^2 + b^2 = 1, \quad (\text{A.9})$$

$$ab + cd = ac + bd = 0, \quad (\text{A.10})$$

$$b^2 + d^2 = c^2 + d^2 = 1. \quad (\text{A.11})$$

De la ecuación A.9 y A.11 observamos que $a, b, c, d \in [0, 1]$, además de que la suma de los cuadrados de algunos de estos pares suman uno, pero no todas las posibles combinaciones de pares aparecen en estas igualdades, en particular no tenemos las igualdades $a^2 + d^2 = 1$ ni $b^2 + c^2 = 1$. Esto en conjunto nos permite proponer la existencia de un parámetro $\theta \in [0, 2\pi)$ tal que

$$a = \cos(\theta) = \pm d,$$

$$b = \sin(\theta) = \pm c.$$

Sustituyendo esta propuesta en las ecuaciones A.9-A.11, tenemos que

$$\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1, \quad (\text{A.12})$$

$$(\cos(\theta))(\sin(\theta)) + (\pm \sin(\theta))(\pm \cos(\theta)) = 0, \quad (\text{A.13})$$

$$(\cos(\theta))(\pm \sin(\theta)) + (\sin(\theta))(\pm \cos(\theta)) = 0, \quad (\text{A.14})$$

$$\sin^2(\theta) + \cos^2(\theta) = 1, \quad (\text{A.15})$$

donde he separado en las igualdades A.13 y A.14 la igualdad A.10. Notemos que las igualdades A.12 y A.15 son una tautología, por lo cual podemos eliminarlas. De las igualdades A.13 ($ab + cd = 0$) y A.14 ($ac + bd = 0$) observamos que c y d deben tener signos opuestos para que las igualdades se sostengan, de modo que si elegimos $c = \sin(\theta)$, entonces $d = -\cos(\theta)$, con lo cual las ecuaciones A.13 y A.14 se satisfacen siempre, para cualquier valor de θ . Esta elección de signos para las variables c y d nos indica que las matrices ortogonales Q son aquellas que pueden expresarse como

$$Q = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad \theta \in [0, 2\pi). \quad (\text{A.16})$$

Por otro lado, si elegimos $c = -\sin(\theta)$, entonces $d = \cos(\theta)$, lo cual mantiene a las ecuaciones A.13 y A.14 como tautologías, pero cambia la forma que tienen las matrices ortogonales Q , quedando ahora como

$$Q = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad \theta \in [0, 2\pi). \quad (\text{A.17})$$

Estas dos posibilidades para expresar a las matrices ortogonales corresponden a una reflexión respecto a una recta que pasa por el origen con un ángulo $\theta/2$ con respecto al eje positivo de las x (A.16) o una rotación en el plano, alrededor del origen, en sentido horario por un ángulo θ (A.17). $\square$

Teorema A.0.4. *El conjunto $\mathbf{O}_2$ de todas las transformaciones ortogonales del plano es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$.*

Demostración. Comencemos demostrando que toda transformación ortogonal $\omega \in \mathbf{O}_2$ es una isometría del plano. Para este propósito, demostremos primero que estas transformaciones preservan la norma.

Sea $\omega \in \mathbf{O}_2$ una transformación ortogonal arbitraria y sea $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano. Utilizando una notación matricial, podemos expresar a la norma de $\vec{x}$ de la siguiente manera

$$||\vec{x}|| = \sqrt{X^T X},$$

donde denotamos por $X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ a la matriz de 2×1 que representa al punto $\vec{x}$ y por $X^T = (x \ y)$ a la matriz transpuesta de X .

Con esta notación, podemos expresar a la acción de ω sobre el punto $\vec{x}$ como

$$\omega(\vec{x}) = \Omega \vec{x} = \Omega X,$$

donde $\Omega \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ es la matriz ortogonal asociada a ω . Con esta aclaración, tenemos la siguiente igualdad

$$||\omega(\vec{x})|| = \sqrt{(\Omega X)^T (\Omega X)}, \quad (\text{A.18})$$

utilizando la propiedad de la transpuesta de un producto de matrices, tenemos

$$\sqrt{(\Omega X)^T (\Omega X)} = \sqrt{(X^T \Omega^T) (\Omega X)} = \sqrt{X^T (\Omega^T \Omega) X}, \quad (\text{A.19})$$

donde se ha utilizado la propiedad de asociatividad del producto de matrices. Como la matriz Ω es una matriz ortogonal, por definición se satisface que $\Omega^T \Omega = I$, siendo $I \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ la matriz identidad. Sustituyendo esto en las igualdades A.19 y A.18, tenemos que

$$||\omega(\vec{x})|| = \sqrt{X^T I X} = \sqrt{X^T X} = ||\vec{x}||, \quad (\text{A.20})$$

de donde concluimos que las transformaciones ortogonales preservan la norma.

Sean ahora $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ dos puntos arbitrarios en el plano con X, Y sus representaciones como matrices de 2×1 . Tenemos que

$$||\omega(\vec{x}) - \omega(\vec{y})|| = ||\Omega X - \Omega Y|| = ||\Omega(X - Y)|| = ||\omega(\vec{x} - \vec{y})|| = ||\vec{x} - \vec{y}||,$$

donde hemos utilizado propiedad de distribución bajo la suma del producto de matrices y la propiedad de las transformaciones ortogonales de preservar la norma. Debido a que se satisface que $||\omega(\vec{x}) - \omega(\vec{y})|| = ||\vec{x} - \vec{y}||$, concluimos que las transformaciones ortogonales son isometrías del plano, con lo cual $\mathbf{O}_2$ es un subconjunto de $\mathbf{E}_2$.

Haciendo uso del *criterio del subgrupo* enunciado en la demostración de A.0.2, demostraremos que $\mathbf{O}_2$ es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$ al mostrar que si $\omega_1, \omega_2 \in \mathbf{O}_2$ son dos

transformaciones ortogonales arbitrarias, entonces la composición de $\omega_1\omega_2^{-1}$ es a su vez una transformación ortogonal.

Primero, mostremos la existencia de la transformación inversa de ω_2 . Sea $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ un punto arbitrario en el plano. Por ser $\omega_2 \in \mathbf{O}_2$ una transformación ortogonal del plano, su acción sobre $\vec{x}$ está determinada por

$$\omega_2(\vec{x}) = \Omega_2 \vec{x},$$

donde $\Omega_2 \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ es una matriz ortogonal. Por definición de matriz ortogonal se satisface que

$$\Omega_2^T \Omega_2 = \Omega_2 \Omega_2^T = I, \quad (\text{A.21})$$

donde Ω_2^T es la matriz transpuesta de Ω_2 e $I \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad. Esta igualdad que satisface la matriz Ω_2^T es la condición que define a la matriz inversa de Ω_2 , de modo que $\Omega_2^{-1} = \Omega_2^T$.

Conociendo la existencia y forma de la matriz inversa de Ω_2 , construimos la transformación inversa de ω_2 como

$$\omega_2^{-1}(\vec{x}) = \Omega_2^{-1} \vec{x} = \Omega_2^T \vec{x}. \quad (\text{A.22})$$

Verifiquemos que esta definición para ω_2^{-1} es efectivamente la transformación inversa de ω_2 , es decir, verifiquemos que la composición de estas dos transformaciones satisface las siguientes igualdades

$$\omega_2(\omega_2^{-1}(\vec{x})) = \omega_2^{-1}(\omega_2(\vec{x})) = \vec{x} \quad (\text{A.23})$$

para todo punto arbitrario $\vec{x}$ en el plano.

Por un lado tenemos, haciendo uso nuevamente de la notación matricial, que

$$\omega_2(\omega_2^{-1}(\vec{x})) = \omega_2(\Omega_2^T X) = \Omega_2(\Omega_2^T X) = (\Omega_2 \Omega_2^T) X = I X = X = \vec{x},$$

donde hemos empleado la igualdad A.21 y la propiedad asociativa del producto de matrices. Por otro lado, tenemos que

$$\omega_2^{-1}(\omega_2(\vec{x})) = \omega_2^{-1}(\Omega_2 X) = \Omega_2^T(\Omega_2 X) = (\Omega_2^T \Omega_2) X = I X = X = \vec{x},$$

donde hemos empleado nuevamente la igualdad A.21 y la asociatividad del producto de matrices. Concluimos entonces que la transformación $\omega_2^{-1}(\vec{x})$ propuesta en A.22 es la transformación inversa de $\omega_2(\vec{x})$.

Mostremos ahora que $\omega_2^{-1}(\vec{x})$ es una transformación ortogonal, esto es, mostrar que Ω_2^T es una matriz ortogonal. Por un lado, tenemos que

$$\Omega_2^T(\Omega_2^T)^T = \Omega_2^T(\Omega_2) = I, \quad (\text{A.24})$$

donde hemos empleado la igualdad A.21 y la propiedad de que para toda matriz A se satisface que $(A^T)^T = A$.

Por otro lado tenemos, de manera análoga al caso anterior, que

$$(\Omega_2^T)^T \Omega_2^T = (\Omega_2) \Omega_2^T = I. \quad (\text{A.25})$$

A partir de los resultados A.24 y A.25 concluimos que la matriz Ω_2^T es una matriz ortogonal y por lo tanto $\omega_2^{-1} \in \mathbf{O}_2$ es una transformación ortogonal.

Por último, demostremos que la composición $\omega_1\omega_2^{-1}$ es una transformación ortogonal. Aplicando la composición sobre un punto $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$ arbitrario en el plano, tenemos que

$$\omega_1(\omega_2^{-1}(\vec{x})) = \omega_1(\Omega_2^T \vec{x}) = \omega_1(\Omega_2^T X) = \Omega_1(\Omega_2^T X) = (\Omega_1 \Omega_2^T) X = \Omega_{12} X,$$

donde hemos definido a la matriz $\Omega_{12} \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$ como el producto de matrices $\Omega_{12} = \Omega_1 \Omega_2^T$. Si logramos demostrar que Ω_{12} es una matriz ortogonal, habremos concluido la demostración deseada inicialmente.

Por un lado tenemos que

$$\Omega_{12} \Omega_{12}^T = (\Omega_1 \Omega_2^T)(\Omega_1 \Omega_2^T)^T, \quad (\text{A.26})$$

usando la propiedad de la transpuesta sobre el producto de matrices y la propiedad de la transpuesta de una matriz transpuesta, tenemos que

$$(\Omega_1 \Omega_2^T)^T = (\Omega_2^T)^T \Omega_1^T = \Omega_2 \Omega_1^T, \quad (\text{A.27})$$

sustituyendo este resultado en A.26 tenemos que

$$\Omega_{12} \Omega_{12}^T = (\Omega_1 \Omega_2^T)(\Omega_2 \Omega_1^T) = \Omega_1(\Omega_2^T \Omega_2) \Omega_1^T = \Omega_1(I) \Omega_1^T = \Omega_1 \Omega_1^T = I, \quad (\text{A.28})$$

donde hemos empleado la definición de que las matrices Ω_1, Ω_2 son ortogonales.

Por otro lado, tenemos que

$$\Omega_{12}^T \Omega_{12} = (\Omega_1 \Omega_2^T)^T (\Omega_1 \Omega_2^T), \quad (\text{A.29})$$

sustituyendo el resultado A.27 en la igualdad anterior tenemos que

$$\Omega_{12}^T \Omega_{12} = (\Omega_2 \Omega_1^T)(\Omega_1 \Omega_2^T) = \Omega_2(\Omega_1^T \Omega_1) \Omega_2^T = \Omega_2(I) \Omega_2^T = \Omega_2 \Omega_2^T = I, \quad (\text{A.30})$$

donde nuevamente hemos hecho uso de la ortogonalidad de las matrices Ω_1, Ω_2 .

A partir de las igualdades obtenidas en A.28 y A.30, concluimos que

$$\Omega_{12} \Omega_{12}^T = \Omega_{12}^T \Omega_{12} = I,$$

con lo que demostramos que la matriz Ω_{12} es una matriz ortogonal y, por lo tanto, la composición $\omega_1\omega_2^{-1} \in \mathbf{O}_2$ es una transformación ortogonal. Este último resultado demuestra que el conjunto $\mathbf{O}_2$ es un subgrupo de $\mathbf{E}_2$. $\square$

Corolario A.0.5. *Toda isometría del plano puede expresarse, de manera única, como una de las siguientes composiciones:*

- Una rotación alrededor del origen seguida por una traslación.
- Una reflexión con respecto a una recta que pasa por el origen seguida por una traslación.

Demostración. En la demostración del teorema 2.1.2, al demostrar la existencia de un elemento inverso para toda isometría del plano (punto iv) se llega al resultado de que toda isometría $g \in \mathbf{E}_2$ puede expresarse como

$$g(\vec{x}) = g(\vec{0}) + M\vec{x} = \tau(\omega(\vec{x})),$$

siendo $\tau \in \mathbf{T}$ una traslación determinada por el vector $g(\vec{0})$ y $\omega \in \mathbf{O}_2$ una transformación ortogonal del plano determinada por la matriz ortogonal $M \in \mathbb{M}_{2 \times 2}$. Como se demuestra en el teorema A.0.3, las transformaciones ortogonales corresponden únicamente a rotaciones alrededor del origen o a reflexiones con respecto a una recta que pasa por el origen, con lo cual se cumple alguno de los dos escenarios planteados.

Para demostrar la unicidad, sea $g(\vec{x}) \in \mathbf{E}_2$ una isometría del plano arbitraria, sean $\tau_1, \tau_2 \in \mathbf{T}$ dos traslaciones del plano diferentes y sean $\omega_1, \omega_2 \in \mathbf{O}_2$ dos transformaciones ortogonales del plano diferentes. Supongamos que a partir de estos elementos se satisface la siguiente igualdad

$$g(\vec{x}) = \tau_1(\omega_1(\vec{x})) = \tau_2(\omega_2(\vec{x})),$$

es decir, para una isometría del plano existen dos representaciones diferentes de ella como una composición de una transformación ortogonal seguida de una traslación. A partir de esta última igualdad tenemos las siguientes igualdades entre composiciones

$$\begin{aligned} \tau_1\omega_1 &= \tau_2\omega_2, \\ \implies \tau_2^{-1}(\tau_1\omega_1) &= \tau_2^{-1}(\tau_2\omega_2), \\ \implies \tau_2^{-1}(\tau_1\omega_1)\omega_1^{-1} &= \tau_2^{-1}(\tau_2\omega_2)\omega_1^{-1}, \\ \implies (\tau_2^{-1}\tau_1)(\omega_1\omega_1^{-1}) &= (\tau_2^{-1}\tau_2)(\omega_2\omega_1^{-1}), \\ \implies \tau_2^{-1}\tau_1 &= \omega_2\omega_1^{-1}, \end{aligned}$$

al ser $\mathbf{T}$ y $\mathbf{O}_2$ grupos, esta igualdad implica que $\tau_2^{-1}\tau_1 \in \mathbf{T} \cap \mathbf{O}_2$, así como $\omega_2\omega_1^{-1} \in \mathbf{T} \cap \mathbf{O}_2$. Sin embargo, el único elemento que existe en $\mathbf{T} \cap \mathbf{O}_2$ es la función identidad, pues toda traslación no trivial (i.e. el desplazamiento por el vector $\vec{0}$) desplaza al origen mientras que toda transformación ortogonal mantiene fijo al origen. De esta manera tenemos que

$$\begin{aligned} \tau_2^{-1}\tau_1 &= I, \quad \omega_2\omega_1^{-1} = I, \\ \implies \tau_1 &= \tau_2, \quad \omega_1 = \omega_2, \end{aligned}$$

lo cual contradice la hipótesis de que son traslaciones y transformaciones ortogonales diferentes; por lo tanto, la representación es única. $\square$

Bibliografía

- [1] P. Luger, *Modern X-Ray Analysis on Single Crystals: A Practical Guide*. DE GRUYTER, Dec. 2014.
- [2] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, “Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry,” *Physical Review Letters*, vol. 53, pp. 1951–1953, Nov. 1984.
- [3] J. Mikhael, M. Schmiedeberg, S. Rausch, J. Roth, H. Stark, and C. Bechinger, “Proliferation of anomalous symmetries in colloidal monolayers subjected to quasiperiodic light fields,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 107, pp. 7214–7218, Apr. 2010.
- [4] W. Steurer, “Boron-based quasicrystals with sevenfold symmetry,” *Philosophical Magazine*, vol. 87, pp. 2707–2712, Jan. 2007.
- [5] M. Schmiedeberg and H. Stark, “Comparing light-induced colloidal quasicrystals with different rotational symmetries,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 24, p. 284101, June 2012.
- [6] “Historia de Alhambra y Generalife.” <https://www.alhambra-patronato.es/descubrir/alhambra-y-generalife/historia>. Accessed: 2024-05-29.
- [7] “La geometría matemática de los alicatados.” <https://www.alhambra-patronato.es/geometria-matematica-alicatados>, Apr. 2017. Accessed: 2024-05-29.
- [8] M. A. Armstrong, *Groups and Symmetry*. Springer New York, 1988.
- [9] “Wallpaper group.” https://en.wikipedia.org/wiki/Wallpaper_group. Accessed: 2024-07-21.
- [10] J. E. Marquina, R. Ridaura, J. L. Álvarez, and M. Quintana, “Il saggiaiore. Un libro poco recordado,” *Ciencias.*, pp. 4–8, Mar. 1996. Accessed: 2024-07-28.
- [11] A. Lacroix, “La vie et l’œuvre de l’abbé Haüy,” *Bulletin de la Société française de Minéralogie*, vol. 67, no. 1, pp. 15–226, 1944.
- [12] H. Kragh, *Quantum generations*. Princeton University Press, 2002.

- [13] “The nobel prize in physics 1914.” <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1914/summary/>. Accessed: 2024-08-07.
- [14] C. Kittel, *Introduction to solid-state physics*. Wiley, 5 ed., 1976.
- [15] A. R. Mendoza, “Movimiento circular en ambientes cuasi-periódicos: magnetorresistencia en cuasicristales,” 2018.
- [16] A. R. Mendoza, “Método dual generalizado descentralizado: algoritmo eficiente para estudiar la dinámica en ambientes cuasiperiódicos,” 2021.
- [17] P. Steinhardt, *The Second Kind of Impossible*. New York: Simon & Schuster, 2019.
- [18] “Scientific background on the nobel prize in chemistry 2011: The discovery of quasicrystals.” <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/advanced-chemistryprize2011-1.pdf>. Accessed: 2024-10-08.
- [19] “The nobel prize in chemistry 2011: Popular information.” <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2011/popular-information/>. Accessed: 2024-10-08.
- [20] “The nobel prize in chemistry 2011.” <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2011/summary/>. Accessed: 2024-10-08.
- [21] P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, “Bond-orientational order in liquids and glasses,” *Physical Review B*, vol. 28, pp. 784–805, July 1983.
- [22] “The nobel prize in physics 2020.” <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2020/summary/>. Accessed: 2024-10-09.
- [23] M. Gardner, “Mathematical games,” *Scientific American*, vol. 236, pp. 110–221, Jan. 1977.
- [24] H. Wang, “Proving theorems by pattern recognition - ii,” *Bell System Technical Journal*, vol. 40, pp. 1–41, Jan. 1961.
- [25] R. Berger, *Undecidability of the Domino Problem*. American Mathematical Soc., 1966.
- [26] J. E. S. Socolar, P. J. Steinhardt, and D. Levine, “Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry,” *Physical Review B*, vol. 32, pp. 5547–5550, Oct. 1985.
- [27] D. Levine and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals: A new class of ordered structures,” *Physical Review Letters*, vol. 53, pp. 2477–2480, Dec. 1984.
- [28] A. Jagannathan, “The fibonacci quasicrystal: Case study of hidden dimensions and multifractality,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 93, p. 045001, Nov. 2021.

- [29] D. Smith, J. S. Myers, C. S. Kaplan, and C. Goodman-Strauss, “An aperiodic monotile,” *Combinatorial Theory*, vol. 4, July 2024.
- [30] R. Paredes, J. L. Aragón, and R. A. Barrio, “Nonperiodic hexagonal square-triangle tilings,” *Physical Review B*, vol. 58, pp. 11990–11995, Nov. 1998.
- [31] “Period of a function.” https://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Period_of_a_function. Accessed: 2024-10-08.
- [32] J. C. Hernandez, “Funciones cuasi-periódicas de Bohr,” *Boletín de Matemáticas*, vol. 16, no. 2, pp. 149–165, 2009.
- [33] “Quasi-periodic function.” <https://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Quasi-periodic%20function&oldid=14617>. Accessed: 2024-10-08.
- [34] F. Gahler and J. Rhyner, “Equivalence of the generalised grid and projection methods for the construction of quasiperiodic tilings,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 19, pp. 267–277, Feb. 1986.
- [35] M. Senechal, *Quasicrystals and geometry*. Cambridge University Press, 1996.
- [36] A. S. Kraemer and D. P. Sanders, “Embedding quasicrystals in a periodic cell: Dynamics in quasiperiodic structures,” *Physical Review Letters*, vol. 111, p. 125501, Sept. 2013.
- [37] B. Dubost, J.-M. Lang, M. Tanaka, P. Sainfort, and M. Audier, “Large AlCu-Li single quasicrystals with triacontahedral solidification morphology,” *Nature*, vol. 324, pp. 48–50, Nov. 1986.
- [38] W. Ohashi and F. Spaepen, “Stable Ga–Mg–Zn quasi-periodic crystals with pentagonal dodecahedral solidification morphology,” *Nature*, vol. 330, pp. 555–556, Dec. 1987.
- [39] A.-P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto, “New stable icosahedral Al-Cu-Ru and Al-Cu-Os alloys,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 27, p. L1587, Sept. 1988.
- [40] A.-P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto, “Icosahedral, decagonal and amorphous phases in Al-Cu-M (M=transition metal) systems,” *Materials Transactions, JIM*, vol. 30, no. 9, pp. 666–676, 1989.
- [41] L. X. He, Y. K. Wu, X. M. Meng, and K. H. Kuo, “Stable Al–Cu–Co decagonal quasicrystals with decaprismatic solidification morphology,” *Philosophical Magazine Letters*, vol. 61, pp. 15–19, Jan. 1990.
- [42] IUCR, “Report of the executive committee for 1991,” *Acta Crystallographica*, vol. 48, p. 928, 1992. Accessed: 2024-10-10.

- [43] X. Zeng, G. Ungar, Y. Liu, V. Percec, A. E. Dulcey, and J. K. Hobbs, “Supramolecular dendritic liquid quasicrystals,” *Nature*, vol. 428, pp. 157–160, Mar. 2004.
- [44] T. Dotera, “Quasicrystals in soft matter,” *Israel Journal of Chemistry*, vol. 51, pp. 1197–1205, Dec. 2011.
- [45] Y. Roichman and D. G. Grier, “Holographic assembly of quasicrystalline photonic heterostructures,” *Optics Express*, vol. 13, p. 5434, July 2005.
- [46] J. Mikhael, J. Roth, L. Helden, and C. Bechinger, “Archimedean-like tiling on decagonal quasicrystalline surfaces,” *Nature*, vol. 454, pp. 501–504, July 2008.
- [47] S. Fischer, A. Exner, K. Zielske, J. Perlich, S. Deloudi, W. Steurer, P. Lindner, and S. Förster, “Colloidal quasicrystals with 12-fold and 18-fold diffraction symmetry,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 108, pp. 1810–1814, Jan. 2011.
- [48] M. Martinsons, M. Sandbrink, and M. Schmiedeberg, “Colloidal trajectories in two-dimensional light-induced quasicrystals with 14-fold symmetry due to phasonic drifts,” *Acta Physica Polonica A*, vol. 126, pp. 568–571, Aug. 2014.
- [49] D. Ratliff, A. Archer, P. Subramanian, and A. Rucklidge, “Which wave numbers determine the thermodynamic stability of soft matter quasicrystals?,” *Physical Review Letters*, vol. 123, p. 148004, Oct. 2019.
- [50] M. Martinsons and M. Schmiedeberg, “Growth of two-dimensional decagonal colloidal quasicrystals,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 30, p. 255403, May 2018.
- [51] M. Mihalkovič and M. Widom, “Spontaneous formation of thermodynamically stable Al-Cu-Fe icosahedral quasicrystal from realistic atomistic simulations,” *Physical Review Research*, vol. 2, p. 013196, Feb. 2020.
- [52] M. Martinsons, J. Hielscher, S. C. Kapfer, and M. Schmiedeberg, “Event-chain Monte Carlo simulations of the liquid to solid transition of two-dimensional decagonal colloidal quasicrystals,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 31, p. 475103, Aug. 2019.
- [53] Y. S. Chan, C. T. Chan, and Z. Y. Liu, “Photonic band gaps in two dimensional photonic quasicrystals,” *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 956–959, Feb. 1998.
- [54] C. Jin, B. Cheng, B. Man, Z. Li, D. Zhang, S. Ban, and B. Sun, “Band gap and wave guiding effect in a quasiperiodic photonic crystal,” *Applied Physics Letters*, vol. 75, pp. 1848–1850, Sept. 1999.
- [55] M. E. Zoorob, M. D. B. Charlton, G. J. Parker, J. J. Baumberg, and M. C. Netti, “Complete photonic bandgaps in 12-fold symmetric quasicrystals,” *Nature*, vol. 404, pp. 740–743, Apr. 2000.

- [56] M. Bayindir, E. Cubukcu, I. Bulu, and E. Ozbay, “Photonic band gaps and localization in two-dimensional metallic quasicrystals,” *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 56, pp. 41–46, Oct. 2001.
- [57] K. Ueda, T. Dotera, and T. Gemma, “Photonic band structure calculations of two-dimensional Archimedean tiling patterns,” *Physical Review B*, vol. 75, p. 195122, May 2007.
- [58] W. Jin, M. Song, X. Yue, and Y. Gao, “Optical induced area-controllable two-dimensional eight-fold symmetric photonic quasicrystal microstructures,” *Optical Materials*, vol. 100, p. 109719, Feb. 2020.
- [59] E. Rousseau and D. Felbacq, “Ray chaos in a photonic crystal,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 117, p. 14002, Jan. 2017.
- [60] P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*. Cambridge University Press, May 1998.
- [61] H. A. Lorentz, “The motion of electrons in metallic bodies i,” *KNAW*, vol. 7, pp. 438–453, 1905.
- [62] C. P. Dettmann, “Diffusion in the Lorentz gas,” *Communications in Theoretical Physics*, vol. 62, pp. 521–540, Oct. 2014.
- [63] B. Wennberg, “Free path lengths in quasi crystals,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 147, pp. 981–990, May 2012.
- [64] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Free path lengths in quasicrystals,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 330, pp. 723–755, Mar. 2014.
- [65] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Power-law distributions for the free path length in Lorentz gases,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 155, pp. 1072–1086, Feb. 2014.
- [66] A. S. Kraemer, M. Schmiedeberg, and D. P. Sanders, “Horizons and free-path distributions in quasiperiodic Lorentz gases,” *Physical Review E*, vol. 92, p. 052131, Nov. 2015.
- [67] T. Dotera, T. Oshiro, and P. Ziherl, “Mosaic two-lengthscale quasicrystals,” *Nature*, vol. 506, pp. 208–211, Feb. 2014.
- [68] P. Kählig and H. Stark, “Phase ordering of hard needles on a quasicrystalline substrate,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 136, May 2012.
- [69] M. Schmiedeberg, “Colloidal particles on quasicrystalline substrates,” 2008.
- [70] V. G. Benza and C. Sire, “Band spectrum of the octagonal quasicrystal: Finite measure, gaps, and chaos,” *Physical Review B*, vol. 44, pp. 10343–10345, Nov. 1991.

- [71] Z. Huo, E. Liu, and J. Liu, “Hollow-core photonic quasicrystal fiber with high birefringence and ultra-low nonlinearity,” *Chinese Optics Letters*, vol. 18, no. 3, p. 030603, 2020.
- [72] N. Ben Ali, V. Dhasarathan, H. Alsaif, Y. Trabelsi, T. K. Nguyen, Y. Bouazzi, and M. Kanzari, “Design of output-graded narrow polychromatic filter by using photonic quasicrystals,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 582, p. 411918, Apr. 2020.
- [73] Y. Trabelsi, N. Ben Ali, W. Belhadj, and M. Kanzari, “Photonic band gap properties of one-dimensional generalized Fibonacci photonic quasicrystal containing superconductor material,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 32, pp. 3541–3547, May 2019.
- [74] X. Liu and X. Sun, “A vertical cavity surface emitting laser based on fibonacci photon quasicrystal cavity,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1237, p. 032079, June 2019.
- [75] S. V. Boriskina, “Making invisible materials,” *Nature Photonics*, vol. 9, pp. 422–424, June 2015.
- [76] A. R. Mendoza and A. S. Kraemer, “Efficient algorithm for simulating particles in true quasiperiodic environments,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 55, p. 245001, May 2022.
- [77] N. de Bruijn, “Algebraic theory of Penrose’s non-periodic tilings of the plane. i,” *Indagationes Mathematicae (Proceedings)*, vol. 84, no. 1, pp. 39–52, 1981.
- [78] G. G. Naumis and J. L. Aragón, “Analytic expressions for the vertex coordinates of quasiperiodic lattices,” *Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials*, vol. 218, pp. 397–402, June 2003.
- [79] A. R. Mendoza, A. S. Kraemer, E. C. Oğuz, and M. Schmiedeberg, “Structural studies of local environments in high-symmetry quasicrystals,” *Scientific Reports*, vol. 13, Oct. 2023.
- [80] S. Fortune, “A sweepline algorithm for Voronoi diagrams,” in *Proceedings of the second annual symposium on Computational geometry - SCG ’86*, SCG ’86, pp. 313–322, ACM Press, 1986.
- [81] J. Marklof and A. Strömbergsson, “The periodic Lorentz gas in the Boltzmann–Grad limit: Asymptotic estimates,” *Geometric and Functional Analysis*, vol. 21, pp. 560–647, Apr. 2011.
- [82] J. Marklof, “Random lattices in the wild: from Pólya’s orchard to quantum oscillators,” *Newsletter of the London Mathematical Society*, no. 493, pp. 42–49, 2021.

- [83] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Kinetic transport in the two-dimensional periodic Lorentz gas,” *Nonlinearity*, vol. 21, pp. 1413–1422, May 2008.
- [84] A. S. Kraemer, N. Kryukov, and D. P. Sanders, “Efficient algorithms for general periodic Lorentz gases in two and three dimensions,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 49, p. 025001, Dec. 2015.
- [85] E. Caglioti and F. Golse, “On the Boltzmann-Grad limit for the two dimensional periodic Lorentz gas,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 141, pp. 264–317, Sept. 2010.
- [86] F. Golse, *The periodic Lorentz gas in the Boltzmann-Grad limit*, pp. 183–201. EMS Press, May 2007.
- [87] E. Caglioti and F. Golse, “On the distribution of free path lengths for the periodic Lorentz gas iii,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 236, pp. 199–221, May 2003.
- [88] F. Golse, *Recent Results on the Periodic Lorentz Gas*, pp. 39–99. Springer Basel, Oct. 2011.
- [89] J. Griffin and J. Marklof, “Quantum transport in a crystal with short-range interactions: The Boltzmann–Grad limit,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 184, July 2021.
- [90] C. A. Reiter, “Atlas of quasicrystalline tilings,” *Chaos, Solitons & Fractals*, vol. 14, pp. 937–963, Oct. 2002.
- [91] C. P. Dettmann, “New horizons in multidimensional diffusion: The Lorentz gas and the Riemann hypothesis,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 146, pp. 181–204, Nov. 2011.
- [92] J. Marklof, “The n-point correlations between values of a linear form,” *Ergodic Theory Dynamical Systems*, vol. 20, pp. 1127 – 1172, 2000. Other: includes appendix by Zeev Rudnick.
- [93] S. Torquato and F. H. Stillinger, “Jammed hard-particle packings: From Kepler to Bernal and beyond,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 82, pp. 2633–2672, Sept. 2010.
- [94] S. Torquato, “Hyperuniform states of matter,” *Physics Reports*, vol. 745, pp. 1–95, June 2018.
- [95] J. E. S. Socolar and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals. ii. unit-cell configurations,” *Physical Review B*, vol. 34, pp. 617–647, July 1986.
- [96] C. Lin, P. J. Steinhardt, and S. Torquato, “Light localization in local isomorphism classes of quasicrystals,” *Physical Review Letters*, vol. 120, p. 247401, June 2018.

- [97] C. Lin, P. J. Steinhardt, and S. Torquato, “Hyperuniformity variation with quasicrystal local isomorphism class,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 29, p. 204003, Apr. 2017.
- [98] S. Torquato and F. H. Stillinger, “Local density fluctuations, hyperuniformity, and order metrics,” *Physical Review E*, vol. 68, p. 041113, Oct. 2003.
- [99] E. C. Oğuz, J. E. S. Socolar, P. J. Steinhardt, and S. Torquato, “Hyperuniformity of quasicrystals,” *Physical Review B*, vol. 95, p. 054119, Feb. 2017.
- [100] E. C. Oğuz, J. E. S. Socolar, P. J. Steinhardt, and S. Torquato, “Hyperuniformity and anti-hyperuniformity in one-dimensional substitution tilings,” *Acta Crystallographica Section A Foundations and Advances*, vol. 75, pp. 3–13, Jan. 2019.
- [101] C. E. Zachary and S. Torquato, “Hyperuniformity in point patterns and two-phase random heterogeneous media,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2009, p. P12015, Dec. 2009.
- [102] C. Lin, P. J. Steinhardt, and S. Torquato, “Corrigendum: Hyperuniformity variation with quasicrystal local isomorphism class (2017 j. phys. condens. matter 29 204003),” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 29, p. 479501, Nov. 2017.