

# QUASI-CRISTALES Y MOSAICOS<sup>1</sup>

Alvaro Lozano Rojo y Marta Macho Stadler

Universidad del País Vasco-Euskal Herriko Unibertsitatea

## Resumen

En este póster se dan unas ideas generales del tema de investigación que hemos abordado recientemente. Comenzamos dando una descripción del comportamiento de los sólidos quasi-cristalinos, justificamos la aparición de los mosaicos en el estudio de este nuevo estado de la materia condensada y finalizamos comentando parte de nuestro trabajo reciente en relación con este tema.

## 1. Quasi-cristales

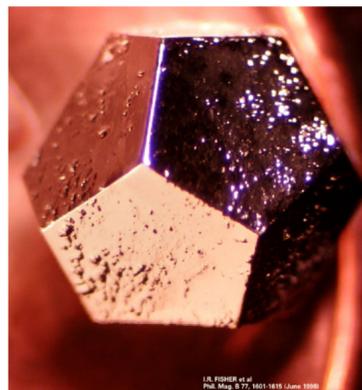
Un *quasi-cristal* es una aleación metálica, donde la disposición de los átomos es regular, como en un cristal, pero aperiódica.

En 1984, D. Schechtman y sus colaboradores (ver [3]) descubren (experimentalmente, enfriando a gran velocidad una aleación de 86 % de aluminio y 14 % de manganeso) un patrón de difracción icosaédrico, presentando una simetría de orden cinco *prohibida* por la cristalografía geométrica: es el primer ejemplo de quasi-cristal.

A partir de este descubrimiento, los quasi-cristales son el objeto de estudios en numerosos dominios científicos. En los dos extremos del espectro, encontramos:

- por una parte, el análisis experimental de sus **propiedades físicas**: baja conductividad eléctrica, bajos coeficientes de fricción, alta resistencia térmica y eléctrica y gran rigidez. Los quasi-cristales se utilizan industrialmente como revestimientos de superficies, como sartenes, en las que se sustituye el revestimiento clásico de *Teflon* por el *Cristome*<sup>®</sup>, una capa de polvo de quasi-cristal compuesto de aluminio, cobre y hierro. Estas nuevas sartenes tienen un gran poder antiadherente y son ultraresistentes: tienen una garantía de veinte años, frente a los dos años de duración de las clásicas;
- por otro lado, su **modelización matemática**: la teoría de teselaciones aperiódicas. Para estudiar estos espacios, se utilizan métodos de teoría ergódica y sistemas dinámicos. Aunque esta aproximación clásica tiene sus límites, y los mosaicos proporcionan ejemplos concretos de *espacios no conmutativos*.

La estructura molecular de los cristales se analiza usualmente bombardeándolos con rayos X y filmando los resultados. Cuando un haz de rayos X incide en un cristal, parte de los rayos lo atraviesan y parte se dispersan. La mayoría de los fotones dispersados se cancelan entre sí: sus ondas interfieren y se anulan. En ciertas direcciones, sin embargo, los fotones salen en fase y sus ondas se refuerzan dando lugar a un haz de rayos X difractados: es el *patrón de difracción* del cristal.



Grano simple del quasi-cristal HoMgZn, formado por holmio, magnesio y cinc (I.R. Fisher et al., Phil. Mag. B 77, 1601-1615, 1998). Nótese la morfología dodecaédrica y sus claras facetas pentagonales.

El conjunto de los vectores de onda  $\mathbf{k}$  (obtenidos a partir de cada *pico de Bragg* en el patrón de difracción, efecto producido cuando ciertas partículas depositan la mayor parte de su energía al pararse) define un retículo discreto, en el que cada vector de onda en la suma puede escribirse como una combinación lineal entera de tres vectores “básicos”  $\mathbf{v}^{(i)}$ ,

$$\mathbf{k} = n_1\mathbf{v}^{(1)} + n_2\mathbf{v}^{(2)} + n_3\mathbf{v}^{(3)}.$$

Los vectores  $\mathbf{v}^{(i)}$  son linealmente independientes y se dice que generan el *retículo recíproco*.

En un quasi-cristal, la situación es similar. Sin embargo, el número de vectores básicos linealmente independientes necesarios para generar el retículo recíproco excede la dimensión espacial y la simetría puntual de este retículo es incompatible con el orden traslacional periódico.

La International Union of Crystallography ha redefinido el término **cristal** como “*cada sólido que tiene un diagrama de difracción esencialmente discreto*”, cambiando el atributo esencial de la cristalinidad desde el espacio de posición, al espacio de Fourier. Esta definición más amplia refleja el actual conocimiento de que la periodicidad microscópica es una condición necesaria pero no suficiente para la cristalinidad.

## 2. Mosaicos

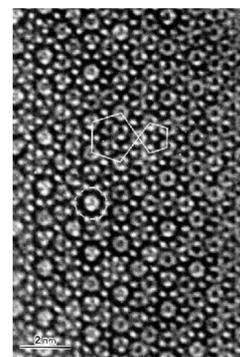
Un *mosaico* o *teselación* del plano (resp., del espacio) es una descomposición del plano (resp., del espacio) en polígonos (resp., poliedros), llamados *teselas*, obtenidos por traslación (o bien mediante un subgrupo de movimientos rígidos que contenga a las traslaciones) a partir de un número finito de teselas modelo.

El interés actual por la teoría de mosaicos se debe, en parte, a que proporcionan modelos para los sólidos quasi-cristalinos, ya que sus discretizaciones constituyen los *patrones de difracción* de ese tipo de sólidos.

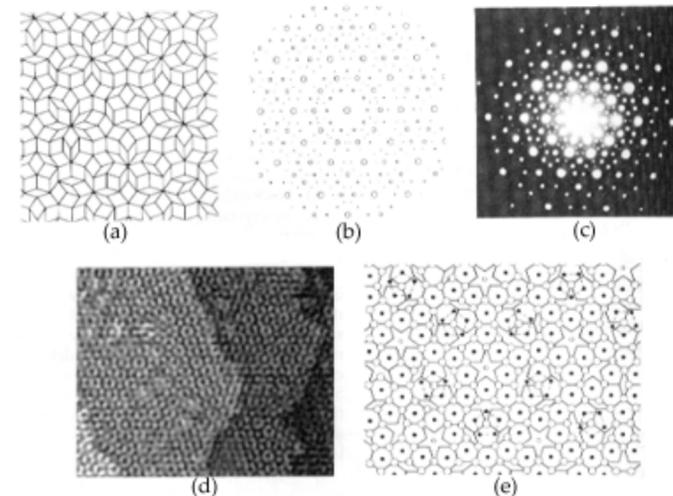
En 1972, el físico R. Penrose “juega” cubriendo el plano con dos tipos de teselas (la *flecha* y la *cometa*) de ángulos iguales a  $\frac{\pi}{5}$  y  $\frac{2\pi}{5}$  (por lo tanto, con simetría pentagonal) que había dispuesto de manera aperiódica. En 1981, Macka aplica las teselaciones de Penrose a la cristalografía por difracción láser a gran distancia.

En la siguiente figura se muestra:

- la teselación de Penrose;
- estructura 3-D basada en la teselación de Penrose, que proporciona un patrón de difracción teórico;
- patrón de difracción de la aleación MnAl: el área de cada disco proporciona la intensidad de cada pico de Bragg;
- imagen al microscopio de la aleación AlCuCo;
- teselación correspondiente a la anterior aleación: Al corresponde a los círculos en blanco y CuCo a los círculos negros.



Las simetrías no cristalográficas no se ven de forma inmediata en la estructura atómica, pero se revelan en experimentos de difracción, como los de difracción de electrones. En la imagen, se observa el patrón de difracción de un quasi-cristal de cinc, magnesio e itrio, ZnMgY (C. Beeli, Tesis ETH Zürich, 1992).



## 3. Nuestro trabajo

Los mosaicos proporcionan algunos ejemplos sorprendentes de **laminaciones**. Para ello, se dota al conjunto de los mosaicos de la topología de Gromov-Hausdorff: dos mosaicos son próximos si coinciden en una gran bola centrada en el origen salvo pequeñas traslaciones. Identificando dos mosaicos con las mismas teselas, se obtiene un espacio métrico compacto, provisto de una laminación definida por la acción natural del grupo de traslaciones. Los mosaicos periódicos (que coinciden con algún trasladado) dan lugar a hojas compactas, pero los mosaicos aperiódicos repetitivos (con la propiedad de isomorfismo local) definen laminaciones minimales.

En el caso de una laminación  $L(\mathcal{P})$  definida por un mosaico  $\mathcal{P}$ , la elección de un punto base en cada tesela modelo determina un conjunto de puntos distinguidos en cada una de las teselas. Por analogía con la terminología usada en el estudio físico de los sólidos quasi-cristalinos, se le llama conjunto de Delone: éste es el proceso de discretización de la laminación. Los mosaicos cuyo origen pertenece a un conjunto de Delone forman una transversal completa  $T_{\mathcal{P}}$ , homeomorfa a un conjunto de Cantor.

Al investigar la naturaleza del espectro de un partícula que se mueva en un mosaico (cuya discretización constituya el patrón de difracción de un quasi-cristal) surge naturalmente el estudio de los espacios no conmutativos asociados a mosaicos: en efecto, el *álgebra de los observables* de este sistema físico es precisamente la  $C^*$ -álgebra de la laminación definida por el mosaico.

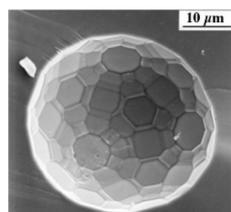
Nuestro objetivo es el estudio dinámico, analítico y K-teórico de la laminación  $L(\mathcal{P})$  a través de la relación de equivalencia discreta  $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}$  inducida por  $L(\mathcal{P})$  sobre la transversal completa  $T_{\mathcal{P}}$ .

El proceso de discretización de las laminaciones definidas por mosaicos permite interpretar a éstas como un caso particular de laminaciones definidas por grafos (se introducen de manera similar a las laminaciones por mosaicos y se conocen mejor sus propiedades). En [1] abordamos el estudio de un ejemplo concreto de laminación definida por árbol aperiódico y repetitivo, la laminación de Ghys, reduciendo su dinámica transversa a una dinámica simbólica gracias a una codificación de las hojas.

Parcialmente financiado por MCyT y MAE (Acción Integrada con Francia) **HF2000-0006** y **BFM2001-3280**.

## Referencias

- [1] F. ALCALDE CUESTA, A. LOZANO ROJO Y M. MACHO STADLER, *Sur une lamination construite par E. Ghys*, en preparación.
- [2] C. JANOT, *Quasicrystals, a primer*, Oxford Science Pub., 1992.
- [3] D. SCHECHTMAN, I. BLECH, D. GRATIAS AND J.W. CAHN, *Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry*, Physical Review Letters 53 (20), 1984.



Agujero cubierto de facetas en un quasi-cristal icosaédrico AlMnPd, formado por aluminio, manganeso y paladio (C. Beeli et al., Philos. Mag. Lett. 78, 339-348, 1998).

Sin embargo, los quasi-cristales “viven” claramente en  $\mathbb{R}^3$ . Aunque puede utilizarse un espacio de dimensión superior para describir una estructura en el espacio de dimensión 3. La idea es proyectar parte de los puntos del retículo de dimensión superior en dimensiones 2 y 3, eligiendo la proyección que preserve la simetría rotacional. De este modo, se obtiene un conjunto de puntos aperiódicos en  $\mathbb{R}^2$  o  $\mathbb{R}^3$ . Eligiendo convenientemente el subconjunto de puntos del retículo que se proyecta sobre el espacio físico, se deduce que el conjunto resultante es a la vez uniformemente discreto (existe una distancia minimal entre puntos) y relativamente denso (no contiene agujeros de tamaño arbitrario): en términos matemáticos, es un *conjunto de Delone*. Estos puntos proyectados forman un mosaico: esta imagen teselada es central en las discusiones energéticas, de entropía y crecimiento del quasi-cristal.

La masa o densidad de carga de un quasi-cristal puede desarrollarse en serie de Fourier, como en el caso de un cristal:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \rho(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$

<sup>1</sup>Trabajo realizado en colaboración con Fernando Alcalde Cuesta, *Universidade de Santiago de Compostela*.