

Simetrías exóticas: de cuasi-cristales y otros sistemas políticamente incorrectos

Gerardo G. Naumis

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apdo. Postal 20-360, 01000, México, D.F., México.

1. Orden y desorden

“Difícilmente se sospecharía la existencia de un detalle importante, que nadie notó durante más de tres siglos”. Así se refiere el texto clásico de A. Einstein y L. Infeld, “La evolución de la física”, acerca de un concepto fundamental de la mecánica, la masa. Lo mismo podría decirse de la cuasi-periodicidad, sólo que pasaron seis o siete siglos antes de siquiera poder visualizar esta nueva y exquisita forma del orden. Pero ¿qué es la cuasi-periodicidad? ¿donde se observa y para que sirve o podría servir?

Empecemos diciendo que la humanidad ha notado desde su origen una tendencia en la naturaleza: la repetición de algunas características o fenómenos. El día y la noche fue tal vez el primer ciclo en ser dilucidado. Mas complicado resultó el entendimiento del movimiento anual de las estrellas, el sol, las estaciones y los complejos ciclos asociados a los movimientos lunares y planetarios. Este conocimiento resultó de gran utilidad en las sociedades. La humanidad aprendió bien esta lección; desde entonces ha sido atenta observadora de la regularidad de patrones. Después de todo, aún la física más moderna sigue razonamientos análogos; la teoría estándar de la formación de los quarks, considerada por muchos como una de las más fundamentales para explicar el mundo natural, tuvo su origen en la observación de las simetrías de un octaedro. Jugando un poco, Gell-Man le llamó a este procedimiento “el camino de los ocho pétalos”. Es difícil no dejarse seducir por el éxito del estudio de patrones. Aún hoy, cualquier prueba de inteligencia respetable recurre a la capacidad de reconocer patrones como una prueba indeleble de la capacidad mental y de análisis. La repetición puede traducirse al lenguaje matemático del estudio de las simetrías. De ahí que muchas teorías tengan una forma muy similar cuando se escriben en este idioma universal. La repetición regular de un patrón se conoce como periodicidad.

La pregunta clave es ¿qué pasa si no hay un patrón claro? Sobran ejemplos: tirar dados, la turbulencia en fluidos, la forma de las nubes, etc. La respuesta no es obvia. Tan es así que llevamos sólo unos trescientos años intentando dar forma a teorías para explicar estos fenómenos. El sentido común indicaría entonces buscar una regularidad en el desorden. Suena paradójico, pero no lo es. Este fue el enfo-

que pragmático intentado por Pascal y otros en el desarrollo de un lenguaje matemático capaz de describir tal monstruosidad. El lenguaje se llamó probabilidad y estadística, creado para explicar porqué en los juegos de azar ciertos resultados aparecen más veces que otros, aún si el resultado no puede predecirse. Gracias al estudio de los juegos, hoy en día contamos con herramientas poderosas para enfrentar con éxito la descripción de lo incierto, irregular o no repetitivo. El estudio de la materia sólida ha imitado el mismo programa. Los primeros cristalógrafos notaron una disposición periódica de los átomos. Más aún, el lenguaje natural para describir la estructura resultó ser el aplicado a la construcción de pisos con baldosas, patrones arquitectónicos o bordados en tejidos. Al descubrirse la mecánica cuántica años después, se tuvo al fin una teoría física que, combinada con la estructura periódica, podía explicar de manera contundente las propiedades físicas tales como conductividad eléctrica, térmica, capacidad calorífica, reflectividad, etc. Detrás de este enfoque está el paso a un espacio de frecuencia de aparición de los patrones, llamado espacio recíproco. La herramienta usada para esto es la serie de Fourier. Si por ejemplo le llamamos $f(r)$ a cualquier función que describa una propiedad estructural del sólido, tal como la densidad o potencial atómico, la periodicidad se traduce en que existe un vector R tal que:

$$f(r) = f(r + R)$$

Dada la periodicidad de una función, esta puede desarrollarse en una serie Fourier,

$$f(r) = \sum_G a_G e^{iGr},$$

donde a_G es el coeficiente correspondiente a cada vector G , correspondiente a la llamada red recíproca, que viene a ser la imagen de la red cristalina en el espacio recíproco [4]. Cada onda que incida sobre el cristal con un vector de onda igual a G será difractada volviéndose una onda estacionaria. Esto es porque la periodicidad del arreglo atómico produce el mismo efecto que una rejilla de difracción óptica. Por ello, los experimentos de difracción en cristales presentan puntos discretos con máximos de amplitud cada vez que el vector de onda incidente es igual a un vector recíproco G . Podría decirse que un experimento de difracción es un retrato del espacio recíproco del material, incluyendo la naturaleza de sus simetrías. De hecho, la intensidad asociada a un punto con coordenadas G en el patrón de difracción viene dada por la norma del coeficiente de Fourier correspondiente $\|a_G\|^2$. Usando la idea de espacio recíproco, se puede demostrar un resultado fundamental del estado sólido: el llamado teorema de Bloch. Este indica que los electrones en un potencial periódico tienen funciones de onda cuánticas que no decaen con la distancia (puede aplicarse una técnica similar para estudiar la propagación de las vibraciones de la red conocidas como fonones). A dichas funciones se les conoce como extendidas. Describen como viaja un electrón

por un sólido sin quedar atrapado en ninguna región. Combinada con las estadísticas cuánticas, el teorema de Bloch permite entender casi todas las propiedades de los cristales.

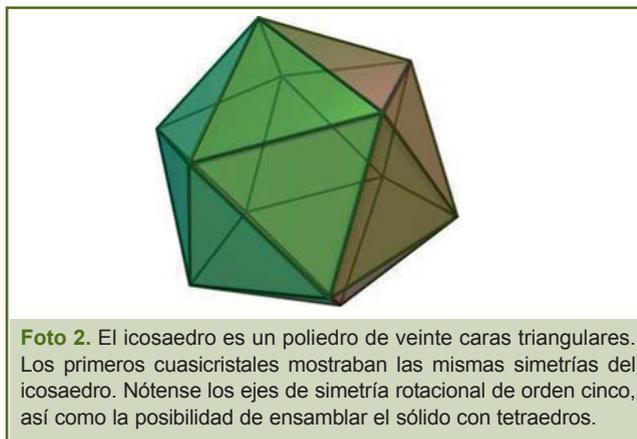
A principios de los años sesenta del XX, empezó a quedar claro que muchos sólidos no presentan un orden estructural de largo alcance. El ejemplo más típico son los vidrios. Dado que muchas herramientas del estado sólido dependen del desarrollo en el espacio recíproco, la física de los materiales desordenados (amorfos) ha tenido un avance muy lento, pero usando siempre su lenguaje natural: la probabilidad y estadística. No existen teorías que puedan generalizar toda la rica fenomenología de los amorfos. En lugar de ello, existen modelos aplicables a ciertas situaciones que explican características generales. Tal vez los resultados más importantes son la existencia de funciones de onda cuánticas localizadas, es decir, los electrones u otras excitaciones elementales pueden ser atrapados en ciertas regiones del sólido. Muchas propiedades físicas dependen primordialmente de estas regiones pequeñas del material.



Para principios la década de los setenta, se pensaba que finalmente se tenía una visión completa del estado sólido. Más aún, se sabía con toda certeza que sólo podían existir cristales con estructuras invariantes ante rotaciones por ángulos de 30°, 60°, 90°, 180° y múltiplos enteros de estos números. Simetrías ante rotaciones por ángulos como 72°, llamadas de orden cinco porque corresponden a 360°/5 (o simetría pentagonal), o 360°/7, 360°/8, etc. quedaban prohibidas. La razón es que resulta imposible llenar un plano con pentágonos, heptágonos, dado que siempre quedan huecos. En otras palabras, el orden periódico obtenido al trasladar el ladrillo básico de la estructura, es incompatible con simetrías rotacionales de orden diferente a dos, tres, cuatro y seis. La predicción de la cristalografía clásica es clara: no pueden existir cristales con simetrías exóticas como cinco, siete,

ocho, nueve, etc. y mucho menos un patrón de difracción formado por puntos luminosos discretos con dichas simetrías. La realidad se mostró reacia a tal afirmación de imposibilidad. En 1984 se encontró una aleación metálica de Aluminio y Manganeso cuyo patrón de difracción mostraba orden de largo alcance con simetrías cinco [13] (ver la figura 1). De hecho el patrón tenía las mismas simetrías que un sólido Platónico de veinte caras con ejes de simetría cinco (figura 2) llamado icosaedro.

Desde entonces se han encontrado muchos otros compuestos con simetrías exóticas. La mayor parte de ellos son de Aluminio aleado con metales de transición, tales como Pd, Cu, Co, etc. A estos materiales se les conoce como *cuasicristales*. Actualmente se consideran como un tercer estado de agregación de la materia, diferente de los cristales o amorfos. El descubrimiento de estos materiales ha planteado retos muy importantes a la física de sólidos. Las preguntas son muy variadas ¿cómo crecen estos sistemas? ¿cuál es su estructura atómica y cómo describirla? ¿cuáles son sus propiedades físicas? Muchas de estas interrogantes siguen sin tener una respuesta definitiva. En realidad sabemos muy poco. Pero, ¿que hay detrás de los cuasicristales?.



Cuasiperiodicidad

Empecemos por develar el detalle importante que había pasado desapercibido durante varios siglos: el orden no implica necesariamente una repetición periódica. Consideremos por ejemplo la función $f(x)$,

$$f(x) = \cos(x) + \cos(\alpha x),$$

Si se requiere que $f(x)$ sea periódica, es sencillo demostrar que α debe ser un número racional, es decir, un número expresable como el cociente de dos enteros. Para α irracional, los periodos de cada coseno resultan ser inconmensurables entre sí. Sin embargo, es claro que $f(x)$ es en si misma una serie de Fourier con solo dos coeficientes distintos de cero: esto indica orden. También es interesante notar que la

serie contiene dos períodos característicos inconmensurables, por lo tanto, el espacio recíproco de $f(x)$ tiene dimensión dos. Esta será una característica fundamental de las funciones cuasiperiódicas: *la dimensión del espacio recíproco es mayor a la dimensión del espacio real*. El ejemplo anterior muestra que existen series de Fourier no periódicas, hecho que generalmente pasa desapercibido para mucha gente. He aquí la clave: periodicidad y orden no son sinónimos, aunque de manera inadvertida la humanidad ha vivido por cientos de años con esa idea. La función $f(x)$ pertenece a un tipo especial de funciones: las cuasiperiódicas. Aunque el nombre sugiere una periodicidad fallida, éste se debe a que el irracional α siempre puede aproximarse mediante una sucesión de racionales. Usando una α racional, $f(x)$ será una función periódica aproximada a la deseada, conocida como aproximante racional. Si α se aproxima mediante el cociente de dos enteros P y Q , tal que $\alpha \approx P/Q$, entonces la función tendrá período $2\pi Q$. El período se hará infinito a medida que aumente el grado de aproximación.

¿Que pasaría con el teorema de Bloch si existiese un potencial con la forma de $f(x)$? En realidad, las primeras experiencias datan de los años 1930. Ya en 1938 Frenkel y Kontorova propusieron un modelo de sólido donde los átomos interactúan mediante un potencial armónico, pero con un campo externo que modula al potencial. Así, el potencial efectivo puede escribirse como la suma de dos funciones periódicas, uno con la periodicidad de la red y el otro es la modulación correspondiente. El modelo dio lugar a una rica fenomenología que aún hoy no acaba de investigarse plenamente. La causa es que aparece la cuasiperiodicidad cuando los períodos en cuestión son inconmensurables entre sí. El segundo precursor de la investigación es el llamado modelo de Harper, propuesto por Peirels a su alumno como tema de tesis doctoral. El problema en realidad era muy simple pero profundo; estudiar la propagación de un electrón en una red cristalina cuadrada cuando se aplica un campo magnético uniforme H . Usando una norma adecuada para el potencial vectorial del campo magnético, el problema puede reducirse básicamente a resolver una ecuación unidimensional de autovalores,

$$\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1} + \cos(2\pi n\phi/\phi_0)\varphi_n = E\varphi_n$$

siendo φ_n la función de onda en un sitio n situado sobre una red unidimensional de átomos, E son los valores propios de la energía, ϕ y ϕ_0 corresponden a los flujos del campo magnético en una celda unitaria de lado a y el flujo cuántico elemental: $\phi/\phi_0 = eHa^2/2\pi(\hbar c/e)$. Esta ecuación, aunque no resulte obvio a primera vista, contiene dos períodos, uno es la distancia entre sitios atómicos; y el otro corresponde a la razón entre flujos magnéticos que aparecen dentro del potencial coseno. Cuando ϕ/ϕ_0 es un número racional, la ecuación puede resolverse mediante el teorema de Bloch, y la probabilidad de encontrar al electrón no decae con la distancia. Sin embargo, si ϕ/ϕ_0 es un irracional, la ecuación no puede resolverse de ese modo. Legítimamente, se podría

pensar que como cerca de un irracional, siempre existe un número irracional, debe usarse entonces, una aproximación en la cual ϕ/ϕ_0 es racional. Al realizarse los cálculos por este método, los resultados cambian radicalmente: las funciones de onda dejan de ser extendidas y decaen con la distancia como leyes de potencia. Aún más, el conjunto de energías permitidas en el caso de ϕ/ϕ_0 racional es continuo, mientras que para valores irracionales las energías permitidas tienen una estructura diferente, discontinua. En la figura 3 se presentan, marcados en negro, los valores permitidos de la energía como función de ϕ/ϕ_0 . Puede observarse que la estructura de la figura es fractal. Se le conoce como mariposa de Hofstadter; Fue descubierta por primera vez en 1974. Este patrón es importante para determinar la conductividad de Hall del sistema en función de ϕ/ϕ_0 , el cual da lugar a un complejo diagrama de fases cuánticas, lo cual es tema actual de estudio para diversos grupos de investigación. Debemos anotar que en un trabajo reciente, hemos demostrado que este espectro es bastante inestable al introducir defectos en la red, debido a un mecanismo en cascada que produce estados localizados en cada brecha del espectro fractal [6].

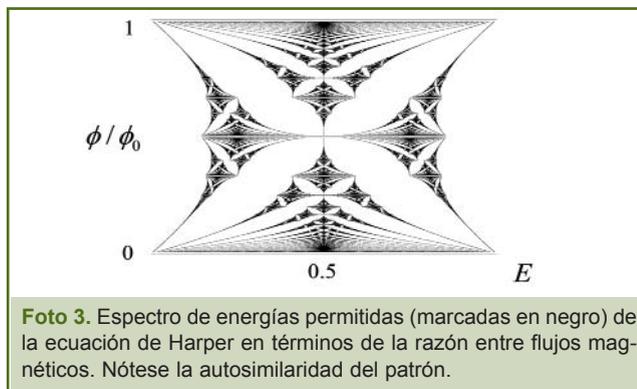


Foto 3. Espectro de energías permitidas (marcadas en negro) de la ecuación de Harper en términos de la razón entre flujos magnéticos. Nótese la autosimilaridad del patrón.

Históricamente, el siguiente paso fue dado por el matemático inglés Roger Penrose, quien a mediados de la década de los setenta estaba buscando una manera sencilla de teselar un plano de manera no-periódica, usando las piezas más sencillas posibles. Finalmente, logró encontrar dos rombos como celdas básicas (ver figura 4), llamados delgado y gordo. Uniendo estos rombos mediante unas reglas de acoplamiento usando flechas en sus vértices, Penrose demostró que se podía llenar el plano de manera no-periódica, como se observa en la figura 4.

El mosaico resultante tenía varias propiedades bastante impresionantes. Por ejemplo, la razón entre rombos gordos a delgados es exactamente la razón dorada $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$. Los ángulos internos de los rombos son múltiplos de $360^\circ/10$ por lo cual la simetría rotacional de orden cinco hace su aparición de manera local en el mosaico (notar las estrellas pentagonales en la figura 4).

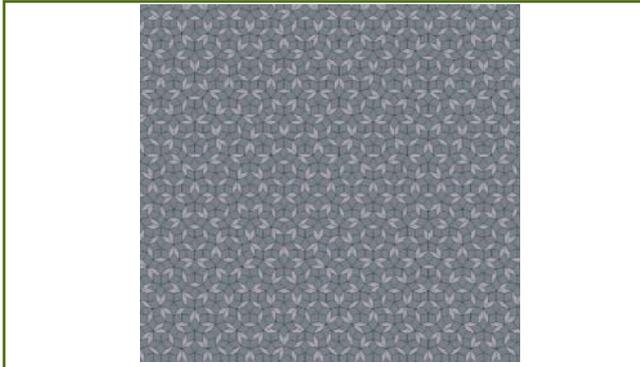


Foto 4. Mosaico de Penrose. Se forma mediante la unión de dos tipo de rombos; delgado y gordo, rellenos en la figura de gris claro y oscuro respectivamente.

Otra propiedad notable es que obedece al llamado teorema de Conway, es decir, dada una configuración de celdas contenidas en un círculo de radio R , puede encontrarse la misma configuración en una distancia menor a cuatro veces ese radio. De hecho, en el mosaico de Penrose las configuraciones aparecen a una distancia exacta de dos veces R . También se observa invariancia de escala, es decir, si se aplica una subdivisión de cada tipo de celda de acuerdo con lo mostrado en la figura 5, aparece un nuevo mosaico de Penrose pero con otra escala.

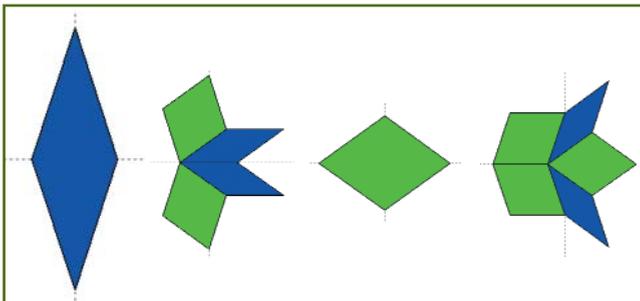


Foto 5. Regla de inflación: a la izquierda un rombo delgado se convierte en dos rombos delgados y dos gordos de menor escala. A la derecha, un rombo gordo se convierte en dos delgados y tres gordos.

Esto hace que el mosaico tenga ciertas propiedades fractales que como veremos, determinan muchas de sus propiedades físicas.

El primero de darse cuenta de la importancia en la física del mosaico de Penrose, fue el eminente cristalógrafo Alan Mackay, quien tuvo la ocurrencia de marcar los vértices de un Penrose sobre una transparencia. Después le pasó un rayo láser con el fin de obtener la imagen en el espacio recíproco del mosaico. Para su sorpresa, el patrón de difracción consistía en puntos luminosos discretos con simetría diez. En la figura 6 se muestra la razón de tal fenómeno. El Penrose contiene familias de planos en cinco direcciones que actúan

como rejillas de difracción. Mackay notó inmediatamente las implicaciones para la física de tal descubrimiento, supuso entonces que podría existir orden orientacional de largo alcance con simetrías exóticas si se relaja la condición de periodicidad; Mas aún, Mackay razonó que el orden rotacional cinco se ve favorecido en las aleaciones metálicas, porque una manera eficiente de empacar esferas localmente es mediante tetraedros. Estos a su vez pueden distorsionarse para formar un icosaedro, por lo cual es muy común que aparezcan estos poliedros como agregados al solidificarse de manera rápida un metal líquido. Sin embargo, los icosaedros no pueden unirse para formar un arreglo ordenado. Así, en tres dimensiones, el empaquetamiento local eficiente se ve frustrado por la imposibilidad geométrica de propagar dicho orden. El mosaico de Penrose mostró que tal vez existiría un escape a este dilema; los cuasicristales descubiertos en 1984 mostraron que éste era el caso. Al enfriar de manera ultra rápida aleaciones de Aluminio y Manganeso, se formaban estructuras que difractaban de manera similar a un Penrose. Aunque hubo diversos debates acerca de la plausibilidad de utilizar mosaicos tridimensionales cuasiperiódicos para modelar la estructura, finalmente se llegó a la conclusión de que este punto de vista era fundamentalmente correcto. En especial, fue dura la batalla contra otro modelo de mosaico aleatorio, donde las reglas de ensamblaje se decidían al azar, formándose un vidrio con un apilamiento casi aleatorio de icosaedros. Una vez ganada esta batalla, el problema se reducía a generar mosaicos y luego a “decorar” con átomos las celdas básicas del cuasicristal. Decorar las celdas ha sido arduo, principalmente por la autosimilaridad de los mosaicos, que dan lugar a una gran ambigüedad. Esto no se ha resuelto de manera terminante, y es común ver artículos en el campo preguntándose: ¿y dónde están los átomos?

La generación matemática de mosaicos ha podido resolverse mediante la proyección de estructuras periódicas de dimensión mayor a una dimensión menor. Consideremos por ejemplo la función $f(x)$ estudiada en las páginas previas. Si ahora definimos una nueva función de dos variables independientes,

$$f(x, y) = \cos(x) + \cos(y)$$

es claro que $f(x)$ se obtiene al cortar la función $f(x,y)$ en una línea tal que $y = \alpha x$. Esta es la idea del llamado método de corte y proyección. Se toma una red cristalina de dimensión mayor, y se escoge un subconjunto de puntos a proyectar mediante un criterio determinado. En general, el método requiere del uso de computadoras para saber que puntos se proyectarán de la red de dimensión mayor. Recientemente, hemos encontrado una manera de encontrar analíticamente las posiciones de los vértices de mosaicos [6].

¿Qué queremos decir con ello? En un cristal, las posiciones de los vértices de la red (r), se obtienen de combinaciones

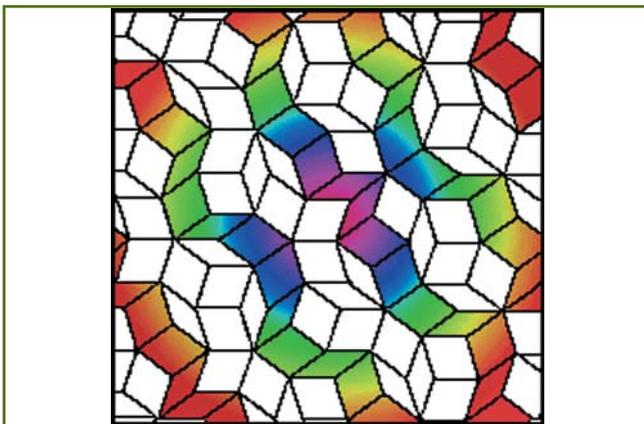


Foto 6. Una de las cinco familias de planos que actúan como rejilla de difracción en el mosaico de Penrose.

lineales con coeficientes enteros (n_1, n_2 y n_3) de los tres vectores base de la red (denotados por e_i con $i = 1, 2$ y 3),

$$r = n_1 e_1 + n_2 e_2 + n_3 e_3.$$

La fórmula equivalente para un cuasicristal es en realidad una extensión de la fórmula anterior, las diferencias básicas son que el número de vectores base utilizados es mayor a 3, y que sólo tres de los coeficientes enteros son independientes. Por ejemplo, para generar un Penrose tridimensional, se necesitan seis vectores base que apunten a los vértices de un icosaedro, denotados por e_i con $i = 1, 2, \dots, 6$. La combinación lineal necesaria tiene la forma,

$$r = n_1 e_1 + n_2 e_2 + n_3 e_3 + n_4 e_4 + n_5 e_5 + n_6 e_6.$$

De hecho, la expresión para los vértices puede escribirse como [7],

$$r_{sjk} = n_s e_s + n_j e_j + n_k e_k + \sum_{l \neq j \neq k} \left[n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} \right] e_l$$

donde el cálculo debe hacerse para todas las tríadas s, j, k que se puedan formar con los vectores de la base. La función $[x]$ denota al menor entero mayor que x , y $V_{sjk} = e_s \cdot (e_j \times e_k)$, es decir, es el volumen del paralelepípedo generado por los vectores base s, j y k .

La naturaleza discreta del patrón de difracción de los vértices generados se deduce inmediatamente de lo anterior. El patrón de difracción es la norma de la transformada de Fourier. Si representamos el potencial dispersor por una delta de Dirac centrado en cada vértice del mosaico, se tiene que la transformada de Fourier vale,

$$I(q) = \sum_{r \in \Omega} e^{iq \cdot r}$$

donde Ω representa al conjunto de todos los vértices. Introduciendo las expresiones encontradas para las posicio-

nes de los vértices, se observan que aparecen términos del estilo,

$$e^{i \left[n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} \right] q \cdot e_l}$$

Usando la identidad, $[x] = x - \{x\} + 1$, donde $\{x\}$ representa la parte fraccional de x , la expresión anterior consiste básicamente en,

$$e^{iq \cdot e_l \left(n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} + 1 \right)} e^{-iq \cdot e_l \left\{ n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} + 1 \right\}}$$

Dado que $\{x\}$ es una función “diente de sierra” con período uno, puede ser desarrollada en serie de Fourier. Así, tendremos varias exponenciales, que al sumarse sobre todos los valores de los coeficientes enteros acaban produciendo funciones delta de Dirac, pero con un número de vectores recíprocos mayor a tres debido a la periodicidad extra introducida por la función $\{x\}$. Como se tienen más de tres vectores base para el patrón de difracción, el espacio recíproco de un cuasicristal está lleno densamente de puntos de difracción. Obviamente, en los patrones experimentales sólo los puntos con mayor intensidad son visibles, aunque en realidad casi en cualquier parte ocurre la condición de difracción. Existe una manera simple de entender esta propiedad. Las reglas de inflación indican que los mosaicos se ven iguales a escalas diferentes, entonces hay “cuasiperíodos” a casi cualquier longitud de onda.

Más aún, la expresión obtenida previamente puede usarse para estudiar la respuesta de un cuasicristal en un experimento de dispersión elástica o inelástica. Si se le llama q al cambio del vector de onda en un experimento de dispersión, ya que la función $\{x\}$ está acotada, del desarrollo previo se tiene que,

$$e^{iq \cdot e_l \left(n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} + 1 \right)} e^{-iq \cdot e_l \left\{ n_s \frac{V_{lsj}}{V_{sjk}} + n_j \frac{V_{ljk}}{V_{sjk}} + n_k \frac{V_{slk}}{V_{sjk}} + 1 \right\}}$$

Al combinarse con las ecuaciones previas, se sigue un hecho importante: el primer término del desarrollo anterior indica que para longitudes de onda larga, el cuasicristal puede verse como un “cristal promedio”. Los términos de orden mayor dan lugar a fluctuaciones respecto a este medio efectivo.

En este punto, conviene hacer notar otra pregunta fundamental que no ha podido resolverse plenamente: el crecimiento de los cuasicristales. Aunque los mosaicos de Penrose se pueden construir siguiendo reglas locales, que podrían ser plausibles a nivel de enlaces atómicos, resulta que al ir construyendo el mosaico, se necesita cierto conocimiento del estado global del mosaico. En otras palabras, las reglas locales tienen cierta ambigüedad y de vez en cuando se necesita dar un vistazo a todo el mosaico para saber si las cosas marchan bien. Esto representa un problema complicado; debemos recordar que los cuasicristales se forman al

enfriar rápidamente una aleación y entonces los átomos no tienen tiempo a una reorganización global. Han existido varios puntos de vista para resolver este problema: por ejemplo, el mismo Penrose dijo que se trataba de una manera nueva en la cual crecían los materiales [10], basado en un colapso súbito de una función de onda total cuántica de los átomos. Esta idea no ha tenido mucha aceptación.; existen materiales cristalinos muy cercanos a los cuasicristales en los cuales no se observa este fenómeno. Tal vez una de las ideas más aceptadas actualmente es el ensamblaje de agregados atómicos mediante una superposición de los mismos. Esta idea fue desarrollada por el investigador de la UNAM David Romeu y su grupo a mediados de los años ochenta [11]. Posteriormente, el concepto fue retomado por Paul Steindhardt y colaboradores [14], quienes utilizaron un resultado matemático debido a Petra Gummelt, el cual mostraba que el Penrose podía generarse con un solo tipo de pieza, superpuesta mediante unas reglas locales de ensamblaje. Este concepto ha sido bastante fructífero, pero desgraciadamente no explica una cuestión fundamental: al parecer los cuasicristales se estabilizan electrónicamente mediante un mecanismo llamado de Hume-Rothery, el cual discutiremos detalladamente en la próxima sección, dentro del contexto de propiedades físicas.

Propiedades físicas de los cuasicristales

El descubrimiento de un tipo nuevo de orden trajo como consecuencia un gran interés en las nuevas propiedades físicas que podrían obtenerse de ellos. Una de las primeras preguntas planteadas fue ¿serán los cuasicristales más parecidos a un conductor que a un aislante? ¿habrán efectos nuevos? El responder a estas preguntas no ha sido fácil desde el punto de vista experimental y mucho menos en la teoría. Existen ciertos consensos basados en exhaustivos experimentos en muestras cada vez mejores. El primer hecho incontrovertible es que los cuasicristales no son buenos metales; su conductividad es cercana muy cercana a la de semiconductores amorfos. Esto no deja de ser sorprendente dado que al formar una aleación de metales, resulta que se obtiene un material cuya resistividad es varios órdenes de magnitud mayor a la de sus elementos constituyentes. Mas aún, en los metales, la resistividad aumenta con la temperatura, en los cuasicristales sucede exactamente lo contrario. La baja conductividad en principio se podría deber a dos efectos: 1) existen pocos electrones en la energía de Fermi de modo que hay pocos de ellos libres capaces de moverse y 2) la naturaleza única de las funciones de onda en los cuasicristales tal vez no es extendida, como sucede en los amorfos. Los estudios experimentales se han movido en la dirección de tratar de dilucidar si están en juego los dos mecanismos o tan sólo uno de ellos. El efecto 1 implica que la densidad de estados electrónica debería ser muy baja o nula alrededor de la energía de Fermi. Estudios de tunelaje, propiedades ópticas, etc. han revelado que dicha característica

existe en todos los cuasicristales; es decir, estos presentan una pseudo-brecha de energía al nivel de Fermi. Un fenómeno similar había sido documentado décadas atrás en diversas aleaciones metálicas, asociado a cambios de fase estructural. Allí se había notado que estos cambios ocurren cuando el número promedio de electrones por átomo está alrededor de 1.6; a esta regla se le llamó de Hume-Rothery. Huelga decir que los cuasicristales siguen la regla de composiciones de Hume-Rothery. Lo importante es que esto apunta a un mecanismo de estabilización electrónica de la estructura atómica, el cual es en realidad el equivalente de la llamada inestabilidad de Peierls en una dimensión. La razón de esta estabilización es la reducción de la energía cinética por electrón al disminuir la densidad de estados en la energía de Fermi. Para que esto ocurra, la estructura debe “acomodarse” y abrir una brecha allí. En el caso de la inestabilidad de Peierls, existe una distorsión de la red de modo que la estructura resulta ser algo así como un cristal modulado. En el caso cuasicristalino ocurre un fenómeno bien conocido en la física de cristales: las brechas energéticas se abren cuando un electrón que trata de propagarse se difracta, produciéndose una onda estacionaria, como se discute en la figura 7. Para que esta condición ocurra, la longitud de onda del electrón debe corresponder con algún período característico del cristal, el cual a su vez, corresponde a un punto de difracción en el espacio recíproco. De hecho, en una dimensión es posible demostrar que por cada punto de difracción con intensidad $||a_G||^2$ se abre una brecha energética de tamaño $\Delta_G \approx 2||a_G||^2$, tal como se indica en la relación de dispersión que aparece en la figura 7.

En la figura 7, se observa que al abrirse una brecha, la energía promedio de los electrones cerca de los límites de la banda de valencia es menor respecto a la línea punteada correspondiente a la red sin deformar. La condición de Hume-Rothery puede resumirse diciendo que los límites de la zona de Brioullin deben tocar la superficie de Fermi. En un cuasicristal, así como en las aleaciones amorfas no existe una zona de Brioullin propiamente dicha, debido a la ausencia de periodicidad, pero en el caso de los cuasicristales, los puntos de difracción más intensos tocan a la superficie de Fermi. Puede demostrarse que estos puntos provienen de la red cristalina promedio, por lo cual ésta se encuentra íntimamente relacionada con la estabilidad del cuasicristal [8].

Retomemos ahora el otro efecto posible sobre la conductividad; la naturaleza de los estados electrónicos. El problema aquí es que si bien un potencial cuasiperiódico puede expresarse como una serie de Fourier, no existe un equivalente al teorema de Bloch. Mejor dicho, el teorema de Bloch se puede escribir formalmente pero no tiene ningún poder predictivo. Para ver porqué sucede esto, escribamos la solución de la ecuación de Schrödinger en un potencial cuasiperiódico en la forma de soluciones de tipo Bloch,

$$\psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

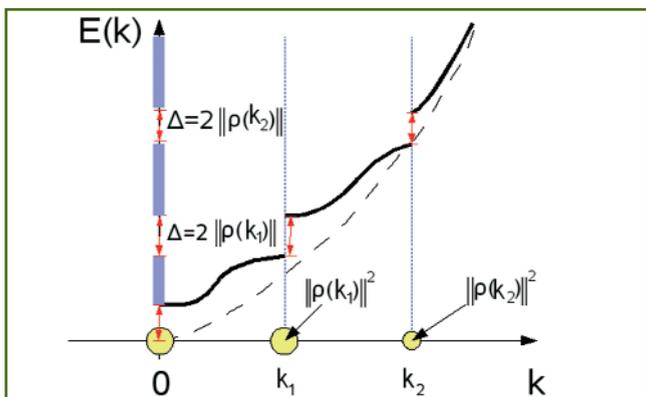


Foto 7. Relación de dispersión de un sólido unidimensional con un potencial periódico (línea sólida). Las brechas de energía se abren debido a la difracción, como se indica mediante los círculos que representan números de onda donde ocurre la difracción. El tamaño de las brechas es proporcional a la intensidad de la difracción. El espectro se indica mediante trazos gruesos sobre el eje de las ordenadas. La línea punteada corresponde a la parábola de electrones libres.

donde k es simplemente una etiqueta para los estados cuánticos. En un potencial periódico, la función moduladora de las ondas planas $u_k(\mathbf{r})$ es periódica, y por lo tanto, su desarrollo en serie de Fourier contiene coeficientes en un conjunto de puntos discretos de los vectores correspondientes en el espacio recíproco,

$$u_k(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} u_k(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$$

En una red cuasiperiódica, los vectores \mathbf{G} llenan densamente el espacio recíproco. Entonces, $u_k(\mathbf{G})$ toma valores en un conjunto tan denso como $u_k(\mathbf{r})$ y por ello no se gana nada al cambiar de espacio; en realidad, el procedimiento formal consistió sólo en un cambio de base. El siguiente intento natural sería considerar una pequeña perturbación cuasiperiódica. Para cristales, este método funciona de manera adecuada. Aplicado a cuasicristales, el método falla y por una razón muy grave: aparece el conocido problema de los divisores pequeños, el cual plagó a la teoría de ecuaciones diferenciales no-lineales. El problema aquí es que al desarrollar los términos perturbativos de la función de onda, pueden aparecer resonancias en términos que se suponen pequeños. Una vez desechados estos intentos masivos de asalto al problema, sólo queda la estrategia de intentar victorias tácticas. Este enfoque ha rendido algunos frutos. Por ejemplo, en una dimensión se puede estudiar el llamado modelo de Fibonacci, en el cual el potencial cuasicristalino se genera con la secuencia de Fibonacci. Para construirla se pueden usar varios métodos, pero el más sencillo consiste en aplicar las reglas de inflación. La secuencia está hecha de dos letras, por ejemplo L y S. Mediante la regla de inflación, la L se convierte en LS, y la S en L. Si empezamos con S, la siguiente generación es L, y después LS, LSL, LSLLS, etc.

Puede demostrarse que esta secuencia es cuasiperiódica. Si se construye un modelo con dos tipos de átomos alternados según esta secuencia, la ecuación de Schrödinger tiene un espectro de tipo fractal, llamado singular continuo. Las funciones de onda no son ni extendidas ni localizadas. Constituyen por sí mismas un nuevo tipo llamadas “críticas”, porque decaen como potencias de la distancia. Muchas de las soluciones son funciones autosimilares, aunque existen otras de tipo caótico. Como consecuencia, la conductividad electrónica a lo largo de la cadena es menor que en un cristal, pero mayor que en un amorfo. Sin embargo, E. Maciá, junto con F. Domínguez-Adame encontró que además existen algunos estados transparentes, es decir, en los cuales la conductividad electrónica no decae sino que es análoga a la de un cristal. Posteriormente, se encontró que la conductividad eléctrica presenta invariancia de escala alrededor de estos estados especiales [12].

Los estados críticos, especiales de los cuasicristales, son una especie de compromiso entre los dos extremos: cristal y amorfo. Podemos entender a qué se debe el compromiso. Por un lado, el teorema de Conway asegura que una configuración local de átomos se encuentra a una distancia no muy grande de otra región análoga. De este modo, una función de onda localizada en una región de tamaño R , tendería a extenderse dado que podría resonar en una región idéntica situada a una distancia que está a lo más a una distancia $4R$. En el ejemplo del mosaico de Penrose, las réplicas están a una distancia $2R$, por lo cual, si $\psi_R(\mathbf{r})$ es la función de onda en un recinto de radio R , es de esperarse que mediante tonaje se cuele a la región análoga, con un amortiguamiento debido al tránsito. La función de onda en el recinto vecino será,

$$\psi_R(\mathbf{r} + 2\mathbf{R}) = g(\mathbf{r})\psi_R(\mathbf{r})$$

Aunque estos argumentos se pueden comprobar de manera detallada en una dimensión, este no ha sido el caso en 2 y 3 dimensiones. La naturaleza del espectro en mosaicos de 2 y 3 dimensiones no es conocida, es decir, no se sabe si es también singular continuo, discontinuo, continuo o una combinación de lo anterior. Lo mismo sucede con las funciones de onda. En el caso concreto del Penrose, se sabe analíticamente que existen estados localizados, llamados confinados, que se deben a la existencia de configuraciones locales. Este tipo de estados también aparecen en amorfos, y producen picos en la densidad local de estados. También se han observado estados críticos y casi extendidos. Más aún, mediante cálculos numéricos usando procedimientos de renormalización, se sabe que existe una especie de energía crítica que separa los estados críticos casi extendidos de los más localizados [9].

Sólo muy recientemente, hemos puesto en evidencia que el Penrose tiene una densidad local muy similar a la de una aleación amorfa, esto debido a los efectos de frustración electrónica. La frustración, que consiste en la imposibilidad de arreglar las fases de la función de onda de modo que en

los sitios atómicos siempre haya entre sí una diferencia de $\pi/2$, produce efectos radicales que no aparecen en una dimensión [9]. De allí la riqueza pero dificultad de estudio de estos sistemas. En los últimos años, se han retomado estas ideas, en el contexto de propiedades magnéticas.

Desde el punto de vista experimental, no está claro si los cuasicristales reales presentan estados críticos. En cambio, se sabe que presentan estados extendidos, por lo cual aún existen ciertos desacuerdos con la teoría. Algunas otras patologías son la no-linealidad y el cambio de signo de los coeficientes termoeléctricos, así como un coeficiente de fricción que es menos de la mitad del observado en aleaciones normales de Aluminio. Otro efecto interesante es la generación eficiente de armónicos ópticos y fonónicos, al incluir en los Hamiltonianos términos no-linealidades. Esto se debe a que el espacio recíproco denso permite satisfacer la conservación de momento en colisiones fonónicas para casi cualquier valor de los momentos antes y después de la colisión [1].

Los cuasicristales también han sido utilizados en la elaboración de sartenes debido a sus ventajosas propiedades superficiales. Recientemente, Enrique Maciá ha realizado un extenso estudio donde demuestra que tienen un futuro promisorio como materiales termoeléctricos. En general, dos de las propiedades más útiles comercialmente hablando, son la baja fricción superficial y la alta dureza debido a la dificultad de los planos atómicos para deslizarse uno sobre otro.

Aplicaciones usando redes cuasiperiódicas artificiales

Aunque en las secciones anteriores nos hemos referido exclusivamente a los potenciales atómicos cuasiperiódicos, también puede crearse este orden de manera artificial. La primera aplicación de la idea no fue muy espectacular; el mosaico de Penrose fue vendido como un rompecabezas. El poseedor de la patente era el mismísimo Penrose. La siguiente aplicación fue aún menos glamorosa: el mosaico se usó como diseño de los plegados en una marca de papel de baño. La razón: la ausencia de periodicidad permitía enrollar el papel de manera más uniforme. La esposa de Penrose encontró el papel en un supermercado, y se entabló un juicio ganado por Penrose. Si bien el *affaire* del papel opacó la idea, en realidad se había dado en el clavo de una hecho importante. La alta simetría rotacional de los cuasicristales puede servir en el diseño de estructuras que requieran esta propiedad. Por ejemplo, últimamente se han buscado materiales con una brecha fotónica que permita transmitir luz en un rango pequeño de longitudes de onda sin grandes pérdidas, con vistas a su uso en computadoras. Los materiales que mejor muestran esta propiedad son los que tienen una zona de Brillouin muy simétrica, derivadas de un grupo puntual con alta simetría. Las estructuras cuasiperiódicas

presentan dicha característica, y por eso son candidatas ideales para este fin [2]. Esta idea fue satisfactoriamente probada mediante la construcción de un Penrose tridimensional hecho de un polímero al cual se le hizo incidir microondas [5]. En un experimento muy reciente, se estudió la dinámica de propagación de ondas mediante un cuasicristal óptico, formado por cinco rayos láser [3] que inciden sobre un material fotosensible. También se han descubierto líquidos complejos con fases miscelares cuasicristalinas [16], lo cual abre la puerta a la cuasiperiodicidad en el contexto de la materia suave. Otro contexto interesante son los experimentos pioneros llevados a cabo por Manuel Torres y su grupo, del Consejo Superior de Ciencia y Tecnología de Madrid, el cual demostró que se pueden generar patrones cuasiperiódicos hidrodinámicos, usando la llamada inestabilidad de Faraday, o más recientemente, usando condiciones de frontera apropiadas [15].

Finalmente, es difícil predecir que otras aplicaciones se harán de la cuasiperiodicidad. Solo diremos que al romper con la muy difundida idea de que periodicidad es igual a orden, se abre un panorama fértil para la ciencia, la tecnología y porqué no, para el puro goce intelectual.

(Se agradece al proyecto DGAPA IN-117806 por su apoyo financiero)

Referencias

- [1] I. CERÓN, G.G. NAUMIS, F. SALAZAR, AND C. WANG, *Phys. Lett. A* **337**, 141-146 (2005).
- [2] CH. DAY, *Physics Today*, 59, No. 6 Junio, 17 (2006).
- [3] B. FREEMAN, *et. al.*, *Nature* **440**, 1166 (2006).
- [4] H. IBACH, H. LÜTH, "Solid State Physics", 3a. edición, (Springer Verlag, Berlin, 2003), p.p. 501.
- [5] W. MAN, M. MEGENS, P.J. STEINHARDT, P.M. CHAIKIN, *Nature* **435**, 993 (2006).
- [6] G.G. NAUMIS, *Phys. Lett. A* **309**, 470-476 (2003).
- [7] G.G. NAUMIS, J.L. ARAGÓN, "Analytic expressions for the vertex coordinates of quasiperiodic lattices", *Z. Kristallogr.* **218**, 397 (2003).
- [8] G.G. NAUMIS, "Phason hierarchy and electronic stability of quasicrystals", *Phys. Rev.* **B71**, 144204 (2005).
- [9] G.G. NAUMIS, R.A. BARRIO, CH. WANG, *Phys. Rev.* **B50**, 9834 (1994).
- [10] R. PENROSE, *La nueva mente del emperador*. (Grijalbo Mondadori, Barcelona, 1991). P. 541.
- [11] D. ROMEU, *Int. J. Mod. Phys. B* **2**, 265 (1988).
- [12] V. SÁNCHEZ, L.A. PÉREZ, R. OVIEDO-ROA, Ch. Wang, *Phys. Rev. B* **64**, 174205 (2001).
- [13] D. SHECHTMAN, I. BLECH, D. GRATIAS AND J.W. CAHN, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [14] P. STEINHARDT, H. JEONG, *Nature* **382**, 431 (1996).
- [15] M. TORRES, J.P. ADRADOS AND F.R. MONTERO DE ESPINOSA, *Nature* **398**, 114 (1999).
- [16] X. ZENG, G. UNGAR, Y. LIU, V. PERCEC, A.E. DULCEY, J.K. HOBBS, *NATURE*, (2004).