

## Algunos aspectos de los cuasicristales

F. Mejía Lira

*Instituto de Física "Manuel Sandoval Vallarta",  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78000 San Luis Potosí, SLP*  
(recibido el 20 de enero de 1988; aceptado el 23 de mayo de 1988)

**Resumen.** Se presenta una visión general de algunos aspectos de los cuasicristales. Después de describir brevemente los diferentes modelos propuestos para los sólidos icosaedrales y señalar de qué manera los resultados experimentales deciden en favor de la existencia del estado cuasicristalino, se describen los embaldosados de Penrose y la cadena de Fibonacci. Se discuten brevemente algunos resultados obtenidos para las propiedades electrónicas de ciertos modelos de cuasicristales de una y dos dimensiones. En el caso de dos dimensiones se enfatiza el efecto de las condiciones de frontera impuestas cuando sólo se considera una porción del cuasicristal. En el caso monodimensional se presenta una forma de diseñar, siguiendo la secuencia de los números de Fibonacci, una familia de aproximaciones sucesivas al cuasicristal.

**PACS:** 61.50.Em, 61.55.Hg

### 1. Introducción

La noción de cuasicristal apareció como algo indispensable para la descripción de fases sólidas con simetría orientacional pero carentes de la habitual simetría translacional en el medio cristalino.

El primer reporte de una fase cuasicristalina fue publicado en 1984 por Shechtman, Blech, Cahn y Gratias [1]. Se refiere a una fase sólida de la aleación  $Al_{86}Mn_{14}$  cuyo patrón de difracción de electrones, con puntos bien definidos, muestra simetría icosaedral. Por una parte, la definición de los puntos significa una estructura altamente ordenada, como la de un cristal; por otra, el orden icosaedral —con sus ejes de simetría pentagonal— es imposible para los cristales tradicionales.

En breve apareció el primer modelo [2], propuesto por Steinhardt y sus colaboradores [2], basado en una generalización de los mosaicos de Penrose [3-5], con simetría icosaedral y con patrones de difracción semejantes a los obtenidos en la referencia 1. La rápida respuesta del grupo de Steinhardt [2] se debe principalmente a que desde hace tiempo ha venido investigando la posibilidad de que la simetría icosaedral esté presente (con alcance infinito) como estado de equilibrio de algún sistema [6]. En particular, había encontrado [7-9] que los líquidos superenfriados muestran un grado sorpresivamente alto (pero de alcance finito) de orden orientacional icosaedral antes de la transición a vidrio.

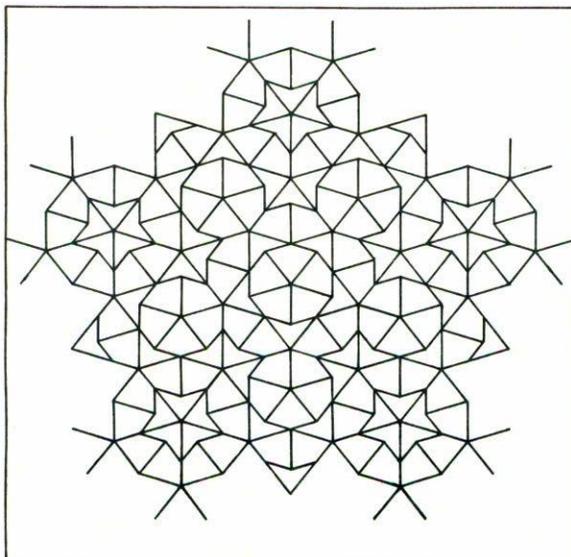


FIGURA 1. Mosaico de Penrose producido con el algoritmo de Mackay con dardos y cometas como figuras básicas.

El modelo cuasicristalino de Steinhardt [2] fue el resultado de construir y analizar el análogo tridimensional de los embaledosados de Penrose (Figs. 1 y 2). Varios años antes, Mackay [10, 11] había estudiado el patrón de difracción de un embaledosado penrosiano con simetría pentagonal, y había desarrollado un algoritmo para generar una cuasimalla bidimensional. Se construyó un empaquetamiento icosaedro en tres dimensiones con dos celdas unitarias romboédricas (Fig. 3), análogas a los mosaicos romboedrales de Penrose. El sistema así construido tiene orden orientacional y orden translacional cuasiperiódico, ambos de largo alcance [9, 12].

El orden cuasiperiódico significaba que la función que describe la densidad de los átomos situados en los puntos de la cuasimalla es cuasiperiódica [13], entendiéndose por función cuasiperiódica aquella que se expresa como una suma de funciones periódicas dos (al menos) de cuyos periodos tienen una razón que es un número irracional.

Varios grupos [14–19] han desarrollado cuasimallas usando diversos métodos basados en el hecho de que una estructura cuasiperiódica puede considerarse siempre como un corte en un sistema periódico de dimensión mayor [20]. Esto ya se había utilizado en el caso de cristales incommensurados [21, 22] (en los que la densidad es cuasiperiódica al menos en una de las direcciones cristalinas tradicionales). Por ejemplo, el embaledosado de Penrose se obtiene como una proyección de una malla hipercúbica simple de cinco dimensiones [23, 24] y la cuasired icosaedro de una proyección de

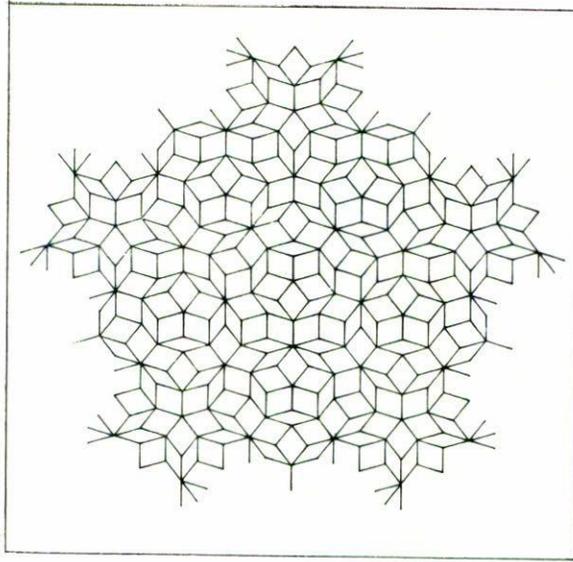


FIGURA 2. Mosaico de Penrose producido con el algoritmo de Mackay con rombos como figuras básicas.

una malla hipercúbica simple de seis dimensiones. Es claro ahora [9, 25, 26] que se pueden construir cuasimallas con simetrías arbitrarias, aunque casi todo el trabajo se ha orientado a las cuasimallas icosaedrales.

En este trabajo se revisan brevemente algunos aspectos de los cuasicristales. Los diferentes modelos propuestos para los sólidos icosaedrales se describen someramente en la sección 2. Ahí se discuten sucintamente las pruebas experimentales que hablan en favor del modelo cuasicristalino. La sección 3 se refiere a los embaldosados de Penrose (dos dimensiones: las generalizaciones a mayores dimensiones se denominan empacamientos de Penrose) que no sólo tienen importancia como punto de partida para la generalización a dimensiones más altas sino que hay la posibilidad de que aparezcan en la naturaleza [26]. Particularmente la fase T del aluminio-manganeso se caracteriza por tener periodicidad simple en una dirección y cuasiperiodicidad decagonal en los planos perpendiculares [27, 28]. En esta sección se revisa también un enfoque para calcular las propiedades electrónicas de cristales bidimensionales construidos con átomos colocados en los vértices de los unidades básicas de Penrose. Se discute solamente la manera de obtener la densidad de estados electrónicos para el caso en que la dinámica electrónica puede describirse por medio de un hamiltoniano de amarre fuerte. Los sistemas cuasiperiódicos en una dimensión se discuten en la sección 4. Se presta especial atención a la cadena de Fibonacci que se encuentra presente en los modelos cuasicristalinos de los sólidos icosaedrales y en los embaldo-

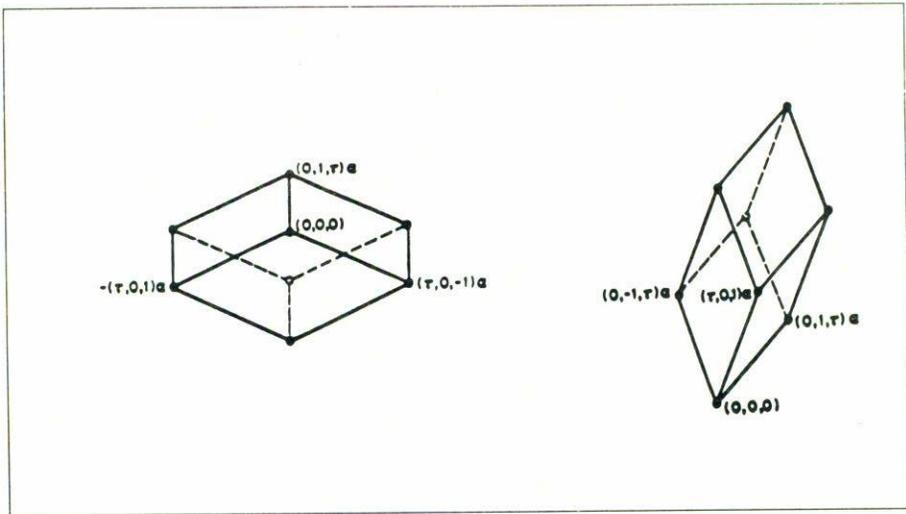


FIGURA 3. Celdas unitarias utilizadas para producir el empaquetamiento icosaedroal cuasicristalino. Aquí  $\tau$  es la razón áurea (figura reproducida de la Ref. 9).

sados de Penrose. Se discute también un modelo (finito) para calcular la densidad electrónica de la cadena de Fibonacci. La sección 5 recoge las conclusiones.

## 2. Cuasicristales: un nuevo estado de la materia condensada

Si los cuasicristales no son el único modelo para las aleaciones que, como la “shechtmanita” [29], muestran simetría icosaedroal, sí se les ha considerado el modelo más radical y a la luz de las pruebas experimentales aparece como el más viable: un nuevo estado de la materia sólida. Steinhardt [30] ha revisado los diferentes modelos existentes y las pruebas que permiten discriminar entre ellos.

Cronológicamente, el primer modelo fue el de “vidrio icosaedroal” [1], que supone que los átomos quedan inmovilizados en un arreglo denso y azaroso en el que los enlaces entre átomos vecinos (o entre cúmulos de átomos) están orientados a lo largo de ejes de simetría icosaedroal [31–33]. Las posiciones ocupadas por los átomos no muestran orden a largo alcance, pero el orden orientacional icosaedroal de largo alcance está presente.

Otra clase de modelos considera la formación de múltiples maclas producidas al empaquetar pequeñas unidades cristalinas en arreglos icosaedrales [34]. Una posibilidad más son los modelos de gran celda unitaria que consisten en grandes cúmulos atómicos con simetría icosaedroal que se empaquetan formando un sistema periódico.

Los modelos pueden separarse en dos clases: a) los que utilizan unidades cristalinas tradicionales (modelo de maclas múltiples y modelos de gran celda unitaria) y

b) los que preconizan el orden orientacional de largo alcance (cuasicristales y modelo de vidrio icosaedroal).

Los estudios experimentales realizados en aleaciones icosaedrales descartan al modelo de maclas múltiples: ninguna microscopía, ni la espectroscopía Mössbauer, han encontrado señal alguna de pequeñas unidades cristalinas, y aunque hay distorsiones menores en los picos del patrón de difracción, son muy distintas de las que ocasionaría la presencia de múltiples maclas.

Los modelos de gran celda unitaria requieren tantos átomos en la celda que realmente vienen a ser indistinguibles del modelo cuasicristalino. Con cúmulos atómicos y celdas unitarias suficientemente grandes siempre se puede obtener una malla recíproca que dé las posiciones de los picos dentro de la precisión experimental. Sin embargo, las celdas unitarias deberían contener cúmulos de más de 15 000 átomos [30].

Las aleaciones icosaedrales producidas en el laboratorio presentan ensanchamientos en los picos del patrón de difracción, señal de desorden con respecto al orden cuasicristalino. Es necesario tener en cuenta las tensiones microscópicas que se presentan durante la solidificación produciendo pequeñas distorsiones al azar que introducen desorden con el consecuente ensanchamiento de los picos [30, 35-37]. Los estudios teóricos recientes [38] de estas distorsiones comparan los ensanchamientos calculados en el modelo de los cuasicristales y en el modelo de vidrio icosaedroal con los obtenidos experimentalmente. El acuerdo decide en favor de los cuasicristales.

Hay un argumento más en favor de la presencia de los cuasicristales en la naturaleza. Además de las muy estudiadas [1, 15, 28, 39-43] aleaciones de Al-Mn, hay en la actualidad muchos otros sólidos icosaedrales entre los que cabe destacar  $\text{Al}_6\text{Li}_3\text{Cu}$  [44] y  $\text{GaMg}_{2.1}\text{Zn}_{3.0}$  [45] porque pueden creerse por métodos convencionales y son estables (no cristalizan al subir la temperatura). Se tiene un sistema estable, que responde al modelo cuasicristalino, frente al modelo de vidrio icosaedroal que predeciría una fase lejos del equilibrio.

La evidencia en favor del modelo de cuasicristales se ha acumulado de tal manera que no puede negarse la presencia de este nuevo estado de la materia condensada en la naturaleza. Sin embargo, todavía es necesario determinar el decorado de la cuasimalla, esto es, la posición detallada de los átomos. Se ha mostrado [26] que si se decora un hipermalla y luego se proyecta (en dos o tres dimensiones) para producir un cuasicristal, el resultado no es equivalente a decorar directamente una cuasimalla de la misma forma producida con el algoritmo de Mackay.

En el estudio teórico de otras propiedades (electrónicas, térmicas, mecánicas, etc.), frecuentemente es necesario aproximar el cuasicristal por medio de un sistema finito: una porción del cuasicristal. Estos sistemas se consideran indistinguibles del cuasicristal correspondiente a excepción de las condiciones de frontera que se impongan. Para la imposición de estas condiciones de frontera conviene tomar en cuenta el punto de vista de que una fase cuasicristalina es la interpolación entre dos fases cristalinas, de manera análoga a la forma en que un número irracional es una interpolación entre dos números racionales [46].

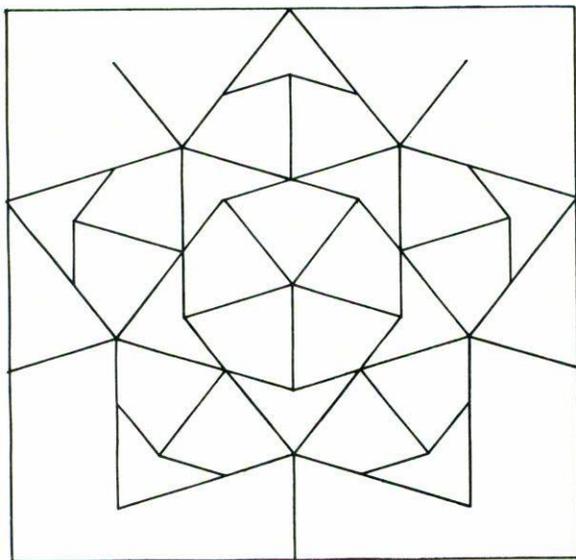


FIGURA 4. Semilla utilizada como punto de partida para generar mediante un proceso deflacionario el mosaico de la figura 1.

### 3. Los mosaicos de Penrose

Los mosaicos de Penrose fueron una solución al problema de la existencia de un conjunto finito de formas de baldosas que cubrieran el plano sólo de manera aperiódica [3, 4]. Los conjuntos de formas de Penrose son pares de figuras. Las formas de un par de Penrose pueden variar, pero los pares más interesantes son: a) dardos y cometas (Figs. 1, 4 y 6) y b) rombos gruesos y rombos angostos (Figs. 2, 5 y 7). Martin Gardner dedicó un artículo en *Scientific American* [5] a las propiedades de ambos tipos de pares, principalmente al de dardos y cometas.

La forma en que se generan los dardos y cometas aparece ilustrada en la figura 6. Se parte de un rombo con ángulos de 72 y 108 grados. Sobre la diagonal mayor se busca el punto que la corta en dos segmentos cuyas longitudes guardan la razón áurea  $(1+\sqrt{5})/2$ , y luego se trazan dos segmentos a partir de él a las restantes aristas. Una vez producidas las unidades básicas (dardo y cometa) se pueden construir otras formas de baldosas con propiedades similares.

El par más común para la generación de cuasimallas (los puntos de la malla son los vértices de las baldosas) es el de los dos rombos. Todos los lados tienen la misma longitud. El rombo grueso tiene ángulos de 72 y 108 grados y el angosto de 36 y de 144 grados. El algoritmo de Mackay se ilustra en la figura 7 para el caso de los rombos. Consiste en una deflación iterativa de una semilla dada (Fig. 5) en la

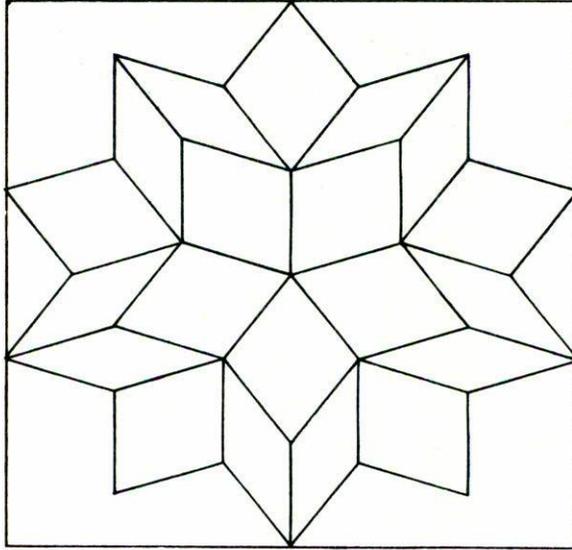


FIGURA 5. Semilla utilizada para generar mediante un proceso deflacionario el mosaico de la figura 2.

que se hacen las divisiones definidas en la figura 7, donde resulta un nuevo mosaico de Penrose con unidades básicas de área menor [47]. La figura 2 se obtuvo por deflaciones sucesivas a partir de la semilla de la figura 5 [47]. De manera similar, la figura 1, de dardos y cometas, se obtuvo por un proceso deflacionario de la semilla de la figura 4 [47].

Las propiedades electrónicas de cuasicristales construidos con base en los embañosados de Penrose se empezaron a estudiar hasta después de la aparición de los sólidos icosaedrales. Inicialmente se pensaba [48] que la densidad de estados electrónicos mostraba una singularidad de van Hove. Posteriormente se ha mostrado [49–51] que hay un estado localizado en el centro de la banda y se ha obtenido [52] la función de onda para el estado base electrónico en mosaicos de Penrose que tienen una transformación de autosimilaridad. Cabe mencionar que la autosimilaridad no es una propiedad de todos los cuasicristales. También se ha estudiado la influencia que tiene el entorno local sobre la estructura electrónica de una cuasired de Penrose [53].

Como se mencionó en la sección 2, la influencia de las condiciones de frontera al considerar cuasicristales finitos es determinante. Una posibilidad para estudiar esta influencia aunque sea en un aspecto restringido es utilizar el método cúmulo más red de Bethe (MCRB) en el que se trata de tomar exactamente la topología local mediante un cúmulo dado y luego se simula el resto del sistema mediante una red de

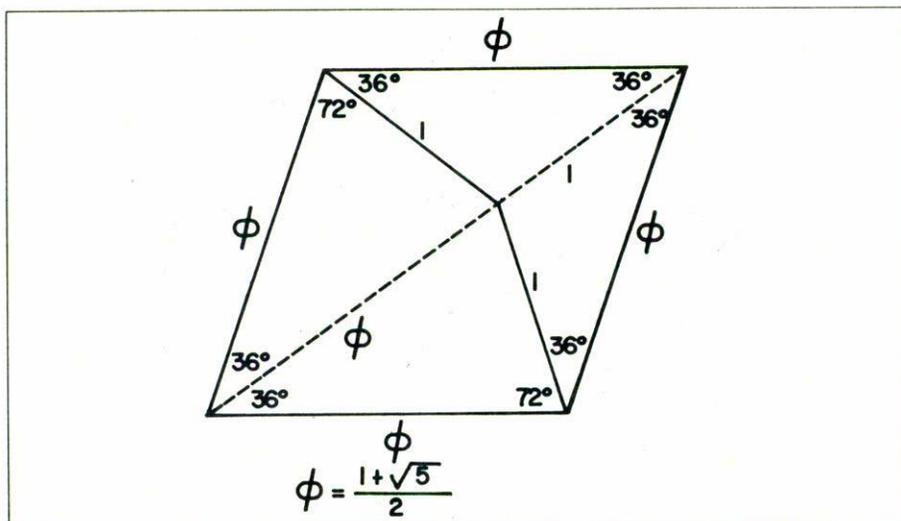


FIGURA 6. Generación de las figuras básicas dardo y cometa a partir de un rombo.

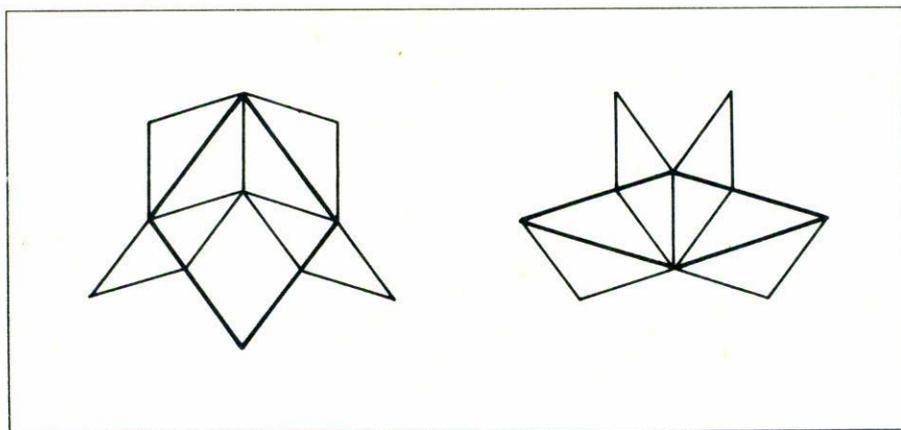


FIGURA 7. Forma en que se dividen los rombos básicos para producir figuras del mosaico deflacionado (algoritmo de Mackay).

Bethe [54]. Este método se ha utilizado extensamente en el estudio de propiedades electrónicas [55], magnéticas [56] y vibracionales [57] de sistemas sólidos.

En el caso del modelo de Penrose de un cuasicristal bidimensional se ha realizado un estudio sistemático para determinar de qué manera las densidades electrónicas locales dependen de la geometría local y del tamaño del cúmulo considerado exactamente [58]. A continuación se describe brevemente este estudio.

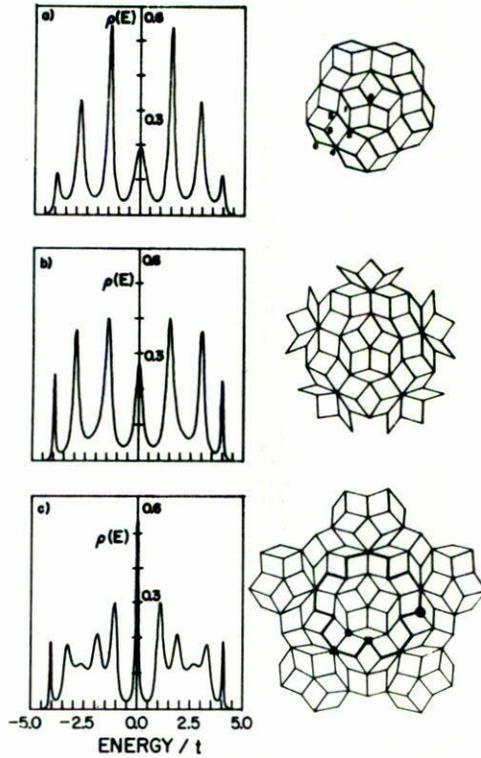


FIGURA 8. Densidades locales de estados electrónicos obtenidas para el sitio central con el MCRB con diferentes cúmulos centrales.

El modelo de cuasicristal consta de una fracción finita de un mosaico de Penrose con los rombos como figuras básicas. Los átomos ocupan los vértices y los electrones pueden saltar solamente siguiendo las aristas de los rombos. Con la hipótesis de que el elemento de matriz  $t$  es el mismo entre vecinos inmediatos y vale cero en los demás casos y escogiendo el cero de la escala de energía convenientemente el hamiltoniano toma la forma:

$$H = - \sum t|i\rangle\langle j|, \tag{1}$$

donde la suma se realiza sobre pares de vecinos inmediatos.

La solución de la ecuación de Dyson lleva a los resultados que aparecen en la figura 8. Se muestran los cúmulos considerados y las correspondientes densidades de estados calculadas para el átomo central. La principal característica de la densidad

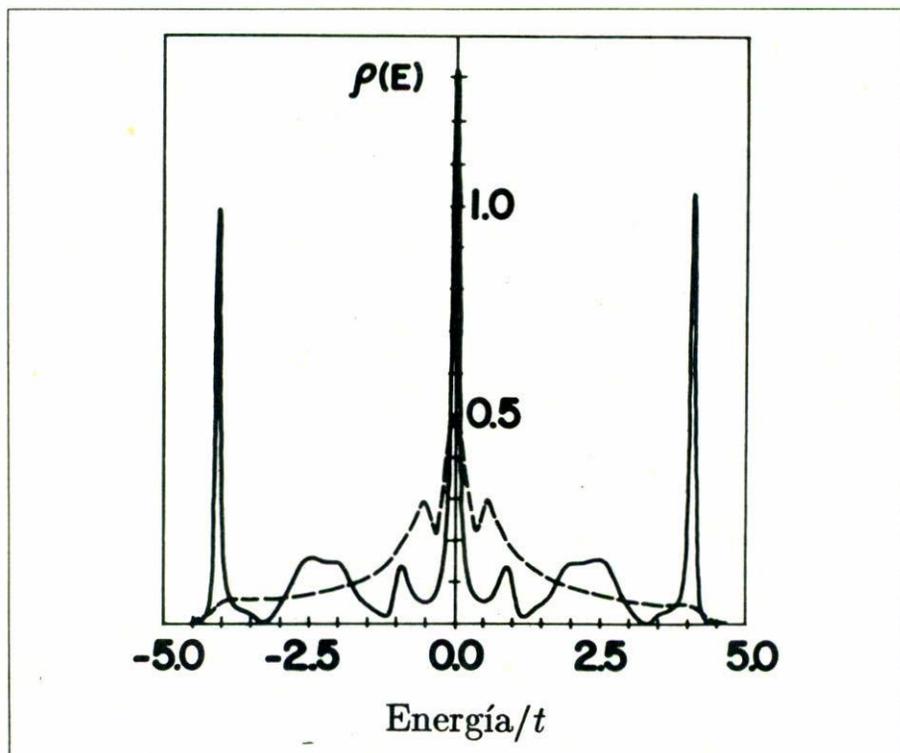


FIGURA 9. Comparación de resultados obtenidos con el MCRB y el método de recursión (línea discontinua) para el sitio marcado con un círculo lleno en la figura 8.

local de estados es que el pico central crece con el cúmulo y el mínimo inmediato decrece. Las extrapolaciones de cálculos numéricos [51] han mostrado que hay un estado localizado en  $E = 0$  con un peso aproximado del 10%, situado en medio de una brecha. Aparentemente, para obtener estos resultados hay que incluir en el cúmulo mucho más sitios. Los picos que aparecen cerca de los bordes de la banda no tienen significado físico y provienen de la conexión del cúmulo con la red de Bethe. Esta es una característica que aparece en los cálculos de MCRB. En general estos picos se reducen al aumentar el tamaño del cúmulo [58].

La figura 9 incluye la densidad local de estados calculada en el sitio marcado con un círculo lleno en la figura 8. Con línea discontinua aparece un cálculo realizado para un sitio con el mismo número de coordinación y entorno cercano mediante el método de recursión aplicado a un sistema de aproximadamente 3 000 átomos [48]. Las características de la densidad local de estados alrededor de  $E = 0$  obtenidas en la referencia 48 ya se encuentran presentes en el resultado obtenido con el MCRB.

Puede notarse que en este enfoque de considerar una muestra finita para repre-

sentar el cuasicristal la convergencia es lenta y hay que incrementar mucho el número de sitios antes de que realmente se pueda decir que se tiene un cuasicristal. Prevalece la ventaja de que puede hacerse un seguimiento del desarrollo de las características propias del cuasicristal a medida que crece el cúmulo. A diferencia del cálculo de la referencia 58 donde se fue construyendo el cúmulo paso a paso, agregando átomos sin romper la simetría, los mosaicos para estudiar propiedades electrónicas pueden obtenerse y crecerse rápidamente mediante el algoritmo de Mackay. Resultados obtenidos por este proceso se publicarán en otra parte [59].

#### 4. Sistemas cuasiperiódicos en una dimensión: cadenas de Fibonacci

La ecuación de Schrödinger con potenciales cuasiperiódicos (o en sistemas incommensurables) se ha venido estudiando [60-64] desde antes de la aparición de los sólidos icosaedrales. Desde entonces varios estudios han sido dedicados a la estructura electrónica y a la naturaleza de los eigenestados de las redes cuasicristalinas en una dimensión [65-72]. Muchos de estos estudios se refieren a una cadena cuasiperiódica especial: la cadena de Fibonacci.

En general, una cadena cuasiperiódica se puede generar como una proyección de una red rectangular de dos dimensiones. La figura 10 ilustra la generación de una cadena por medio de la proyección de una red cuadrada. Las coordenadas de la estructura monodimensional cuasiperiódica obtenida están dadas por: [71]

$$u_n = nl_m + g(n), \quad (2)$$

donde  $l_m$  es el espaciamiento promedio,

$$l_m = \frac{\tan \theta \sin \theta + \cos \theta}{1 + \tan \theta} = (\sin \theta + \cos \theta)^{-1}$$

y la función  $g$  es

$$g(x) = (\cos \theta - \sin \theta) \left[ F(x \tan \theta (\tan \theta + 1)^{-1}) - 1 \right], \quad (3)$$

que incluye la función  $F(z)$  que denota la parte fraccional de  $z$ .

La cadena de Fibonacci se obtiene cuando  $\tan \theta = (1 + \sqrt{5})/2$ . El nombre de cadena de Fibonacci obedece a razones históricas. Leonardo de Pisa (Fibonacci) hizo contribuciones importantes a la matemática. Entre otras cosas influyó mucho para la introducción del sistema de numeración indo-arábigo en occidente. El *Liber Abaci*, la más conocida de sus obras, es en realidad un tratado sobre dicho sistema y fue publicado a comienzos del siglo XIII. El nombre de Fibonacci se encuentra ligado en la actualidad a un problema incluido en el *Liber Abaci*:

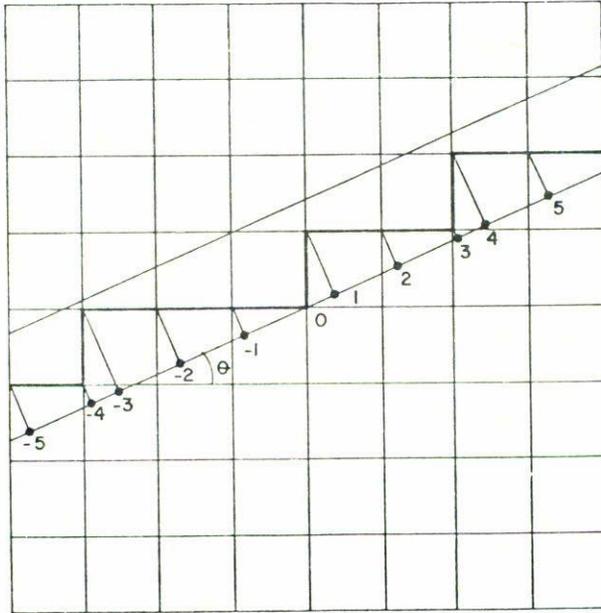


FIGURA 10. Proyección de una sección de una red cuadrada para producir una cadena inconmensurable.

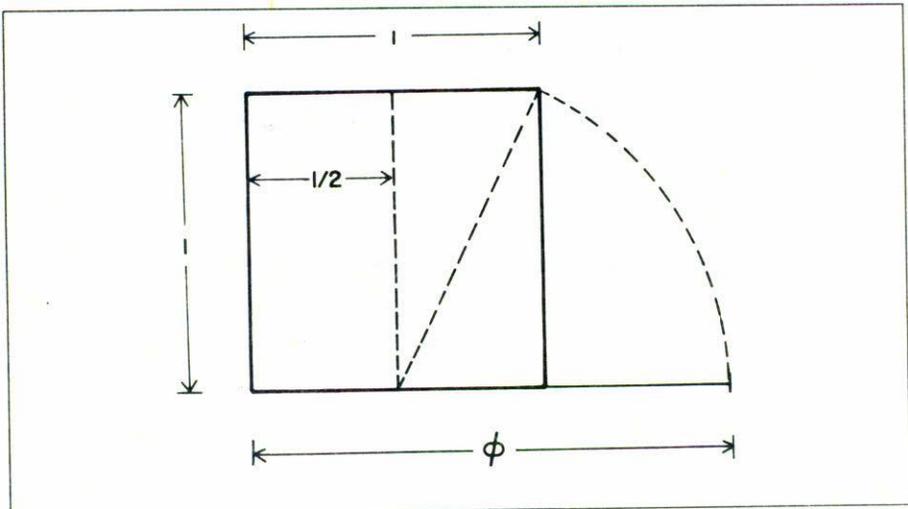


FIGURA 11. Generación geométrica de la razón áurea.

Imaginemos, escribía Leonardo, un par de conejos adultos, macho y hembra, encerrados en un cercado donde pueden anidar y criar. Supongamos que los conejos empiezan a procrear a los dos meses de su nacimiento, engendrando siempre un único par macho/hembra, y a partir de ese momento, cada uno de los meses siguientes, un par más de iguales características. Admitiendo que no muriese ninguno, ¿cuántos conejos contendría el cercado al cabo de un año? [72]

Se encuentra que el número de parejas en cada mes forma la sucesión: 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 58, . . . , que fue bautizada con el nombre de “sucesión de Fibonacci” por Edouard Lucas el siglo pasado.

La sucesión de Fibonacci está fuertemente relacionada con la razón áurea, la que también es importante en la historia. La figura 11 muestra la forma para generarla geoméricamente. También se le ha dado el nombre de “proporción divina”, y son muy numerosos los tratados que se le han dedicado. Es la razón en que se divide un tramo de recta cuando la longitud del segmento mayor es a la del menor como la longitud total es a la del segmento mayor. Esta definición lleva directamente a la ecuación  $\phi^2 - \phi - 1 = 0$ , cuya solución positiva es el número irracional  $(1 + \sqrt{5})/2$ .

Si la ecuación se escribe  $\phi = 1 + 1/\phi$  da lugar a la solución:

$$\phi = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}$$

Una fracción continuada como:

$$x = a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots}}$$

donde todas las  $a_i$  son números enteros, se puede escribir en la forma compacta

$$x = [a_1, a_2, a_3, \dots]. \tag{4}$$

Una fracción continuada infinita como (4) representa un número irracional. La sucesión de números racionales

$$c_1 = [a_1], \quad c_2 = [a_1, a_2], \quad c_3 = [a_1, a_2, a_3], \quad \dots$$

construida con porciones de la fracción continuada infinita, converge al número irracional correspondiente. Cada uno de los elementos de esta sucesión se denomina un aproximante (o convergente) del número irracional dado.

Para  $\phi$  la sucesión de convergentes es:

$$1, 2, 3/2, 5/3, 8/5, 13/8, \dots, \tag{5}$$

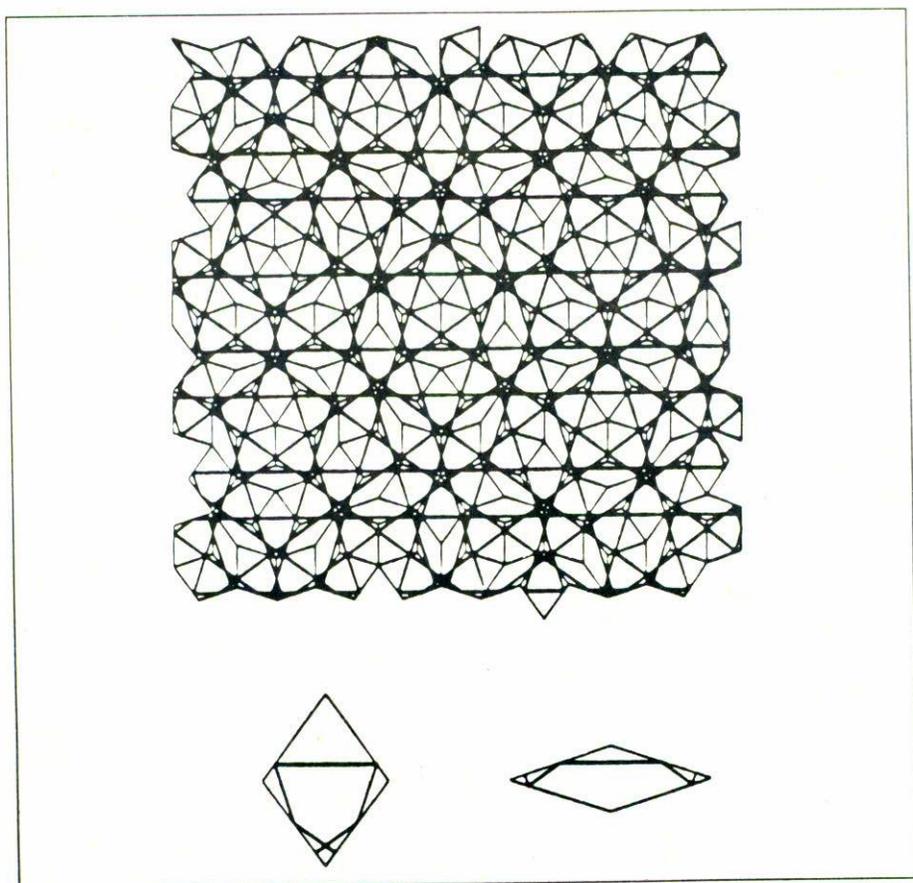


FIGURA 12. Mosaico de Ammann, resultante de un decorado realizado sobre los rombos básicos de Penrose.

obtenida al dividir cada elemento de la sucesión de Fibonacci por el inmediato anterior. La convergencia es lenta, lo que en ocasiones se expresa diciendo [46] que la razón áurea es el número irracional más alejado de los números racionales. Esta es una razón más para escoger  $\phi$  como la pendiente de la recta de la figura 10.

La cadena de Fibonacci construida a partir de la ecuación 2 se encuentra de diversas formas en los embaledos de Penrose y en los empacamientos icosaedrales [76]. Por ejemplo, en el mosaico de Ammann (Fig. 12), un decorado de un embaledado de Penrose, se puede ver que las líneas formadas a partir del decorado se encuentran separadas de manera análoga a los sitios de la cadena de Fibonacci.

El interés por estructuras con la naturaleza de la cadena de Fibonacci es sufi-

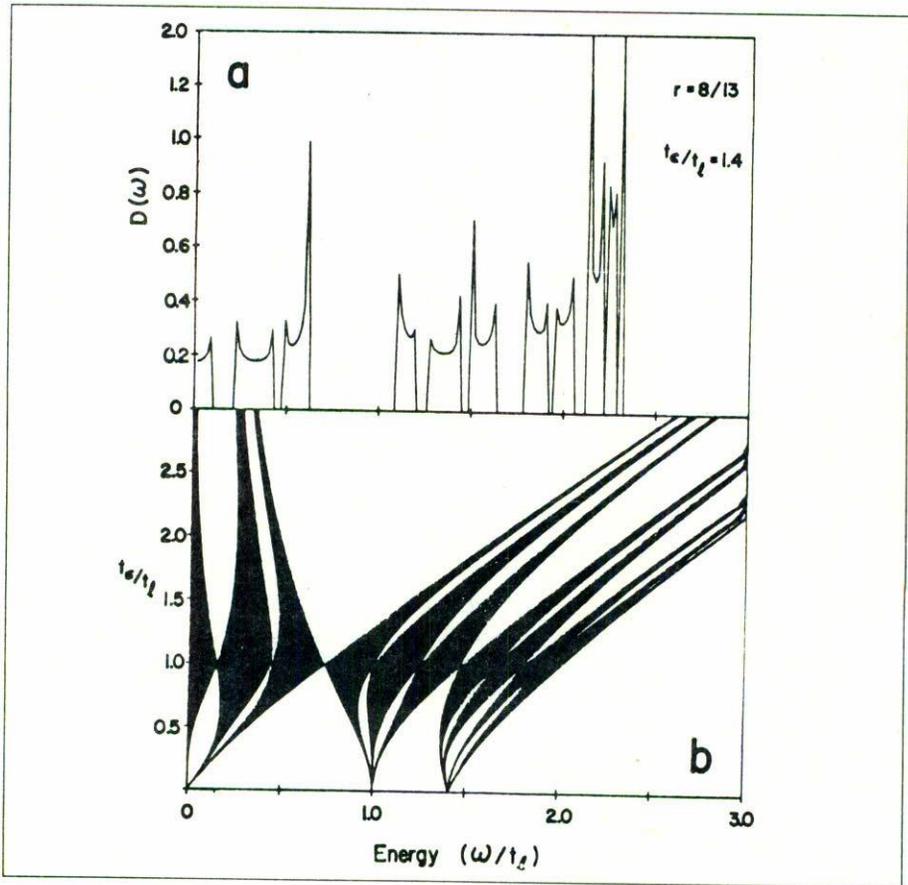


FIGURA 13. Densidad de estados electrónicos de una cadena infinita con periodo 21 (Nótese que sólo se incluye la mitad del espectro simétrico de energía): a) se muestra la densidad total de estados para el valor 1.4 de la razón  $t_c/t_l$ ; b) el comportamiento de bandas y brechas al variar la razón de las matrices para los enlaces corto y largo.

cientemente alto como para producir superredes con espesores que siguen el mismo orden [77, 78].

Se ha sugerido que el espectro electrónico de una cadena de Fibonacci consiste de bandas continuas inmersas en una distribución de brechas de ancho infinitesimal. Una forma de corroborar esto es estudiar las tendencias de bandas y brechas al aproximar sucesivamente la cadena de Fibonacci por cadenas periódicas cuyos periodos siguen la sucesión de los aproximantes (Ec. 5) [72]. Así, cada aproximante da la razón del número de tramos largos al de cortos, y el arreglo detallado de los tramos dentro del periodo está dado por la ecuación 1. Cada periodo en la cadena infinita

se puede tratar como una "molécula" y de esta manera resolver analíticamente, para algunos hamiltonianos, cadenas de periodos mayores cada vez.

Si los elementos  $t_{ij}$  de una matriz toman valores  $t_l$  y  $t_c$  cuando átomos idénticos están conectados por tramos largos y cortos, respectivamente, y cero en todos los demás casos, el hamiltoniano de enlace fuerte se puede escribir como

$$H = \sum t_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (6)$$

donde la suma se realiza sobre pares de vecinos inmediatos.

Los cálculos analíticos muestran que, efectivamente, el número de bandas y brechas crece con el número de puntos incluidos en el periodo.

La figura 13a muestra los resultados obtenidos para la densidad total de estados electrónicos en el caso del aproximante  $8/13$  de  $\phi^{-1} = (\sqrt{5} - 1)/2$  y con  $t_c/t_l = 1.4$ . La parte b de la misma figura es el comportamiento de las bandas y las brechas al variar el valor de  $t_c/t_l$ . Hay 21 bandas (20 brechas). Para otros aproximantes se observa lo mismo: el número de bandas es el número de sitios incluido en el periodo. Se observa también que al tender a cero la razón  $t_c/t_l$  se producen cinco estados localizados que corresponden a los estados de las "moléculas" con tres y con dos átomos. Lo mismo, cuando  $t_c/t_l$  crece indefinidamente se producen tres estados localizados, correspondientes a una "molécula" de dos átomos y a un átomo aislado.

Las dos brechas mayores fueron obtenidas en un cálculo numérico de los espectros electrónicos de una cadena de Fibonacci con 5 000 átomos usando el método de recursión [70]. Las condiciones de frontera en este último cálculo ocasionan que los límites de las bandas no aparezcan tan bien definidos como en el cálculo de la referencia 72. A pesar de que la sucesión de aproximantes converge lentamente a la razón áurea, puede considerarse este enfoque como viable para el estudio de la distribución de brechas y bandas al crecer sucesivamente, de acuerdo con la secuencia de aproximantes de Fibonacci, la longitud de la cadena.

## 5. Conclusiones

Las pruebas experimentales realizadas en sólidos icosaedrales apoyan la presencia de los cuasicristales como un nuevo estado de la materia condensada. Cabe esperar que cualquier simetría pueda aparecer.

El entendimiento de las propiedades de cuasimallas bidimensionales es importante tanto por el hecho de que aparecen en los cuasicristales tridimensionales como porque hay sistemas en que aparecen cuasicristales bidimensionales combinados con otra dirección en la que hay estricta simetría translacional.

En el estudio de los cuasicristales en cualquier dimensión es necesario hacer aproximaciones en las que la influencia de las condiciones de frontera es fuerte. Por otro lado, el punto de vista de aproximar un cuasicristal construyendo sistemas periódicos con fracciones de cuasicristales parece viable. Aquí sólo se presentaron

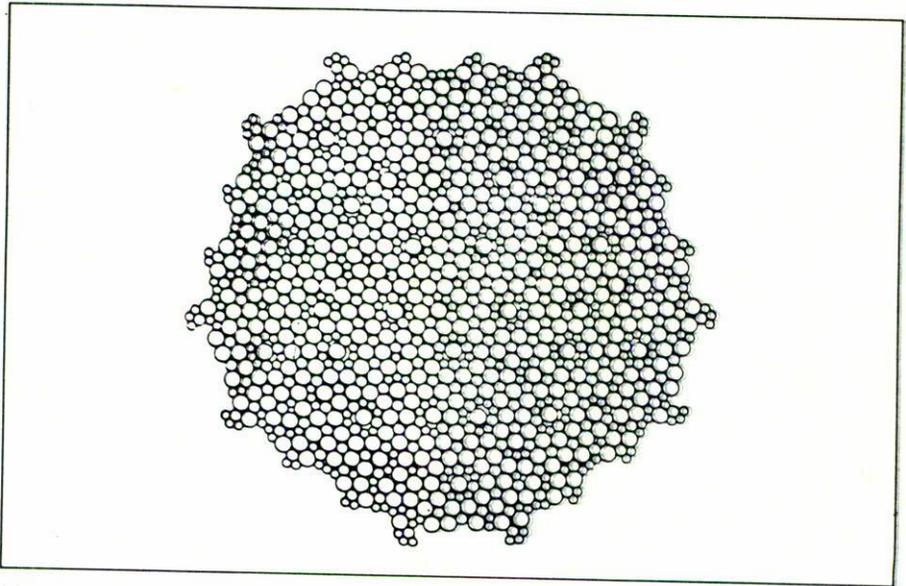


FIGURA 14. Decorado con aleación ternaria de un mosaico de Penrose: se han usado tres tamaños de esferas y se ha introducido una relajación estática bajo un potencial de Lennard-Jones (figura reproducida de la Ref. 12).

ejemplos con cúmulos relativamente pequeños a fin de mostrar la forma en que el método se aplica. En dos dimensiones una combinación del algoritmo de Mackay y el MCRB permite ir a cúmulos suficientemente grandes. La analogía con los números irracionales que aparecen como interpolación entre dos números racionales es clara. Los cuasicristales serían una interpolación entre dos fases cristalinas.

Aunque mucho se ha avanzado en el estudio de los cuasicristales quedan también muchas preguntas sin contestar. Entre otras cosas falta una descripción detallada de los decorados de los sólidos icosaedrales conocidos, esto es, de la colocación precisa que guardan los átomos en las celdas (como ejemplo de lo que puede resultar de un decorado, véase la Fig. 14). Los estudios realizados acerca del orden de las aleaciones son por ende tan sólo preliminares; la estructura misma de los cuasicristales hace prever especiales propiedades mecánicas, pero no hay muchos estudios en esta dirección y las propiedades magnéticas ni siquiera han sido tocadas.

### Agradecimientos

Este trabajo es una reelaboración del material expuesto en una sesión plenaria del XXX Congreso Nacional de Física que se verificó en Mérida, Yuc., México, del 26 al 30 de noviembre de 1987. Agradezco la invitación que para dar esa plática

me extendió la Mesa Directiva de la Sociedad Mexicana de Física. Algunas figuras provienen de un trabajo del Prof. Paul Steinhardt, le agradezco su permiso para utilizarlas. Agradezco al Prof. François Gautier algunas discusiones sobre el tema que me han resultado muy útiles. Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por la Dirección General de Investigación Científica y Superación Académica de la Secretaría de Educación Pública a través del convenio C87-08-0300, anexo 4, y por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología a través del convenio P228CCOX880186 y los anexos 1, 6 y 7 del convenio único UASLP-DAFRHU-CONACYT.

### Referencias

1. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1951.
2. D. Levine y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 2477.
3. R. Penrose, *Bull. Inst. Math. Appl.* **10** (1974) 266.
4. R. Penrose, *Math. Intell.* **2** (1979) 32.
5. M. Gardner, *Sci. Am.* **236** (1) (1977) 110.
6. P. Chaudhari y P.J. Steinhardt, in *Amorphous Materials: Modeling of Structure and Properties*, p. 239, editado por V. Vitek, AIME, Nueva York, EUA (1982).
7. P.J. Steinhardt, D.R. Nelson y M. Ronchetti, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981) 1297.
8. P.J. Steinhardt, D.R. Nelson y M. Ronchetti, *Phys. Rev. B* **28** (1983) 784.
9. D. Levine y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 596.
10. A.L. Mackay, *Sov. Phys. Crystallogr.* **26** (1981) 517.
11. A.L. Mackay, *Physica* **114 A** (1982) 609.
12. J.E.S. Socolar y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 617.
13. Aquí no se hace la distinción entre funciones cuasi y cuasiperiódicas. En el segundo caso la suma de funciones que representa a la función cuasiperiódica contiene un número infinito de términos. Véase: A.S. Besicovich, *Almost periodic functions* (Cambridge, London, GB, 1932); H.A. Bohr, *Almost periodic functions* (Chelsea, Nueva York, EUA, 1947)
14. P. Kramer y R. Neri, *Acta Cryst. A* **40** (1984) 580.
15. P. Bak, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1517.
16. V. Elser, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 4892.
17. P. Bak, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 5764.
18. M. Duneau y A. Katz, *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 2688.
19. R.K.P. Zia y W.J. Dallas, *J. Phys. A* **18** (1985) L341.
20. P. Bak, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 861.
21. A. Janner y T. Janssen, *Phys. Rev. B* **15** (1977) 643.
22. A. Janner y T. Janssen, *Physica* **99 A** (1979) 47.
23. N.G. de Bruijn, *Ned. Akad. Wet. Proc. A* **43** (1981) 39.
24. N.G. de Bruijn, *Ned. Akad. Wet. Proc. A* **43** (1981) 43.
25. J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt y D. Levine, *Phys. Rev. B* **32** (1985) 5547.
26. M.V. Jaric, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 4685.
27. L. Bendersky, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 146.
28. R. Pérez-Campos, J.G. Pérez-Ramírez, A. Gómez, R. Herrera y M. José-Yacamán, *Scripta Metall.* **20** (1986) 401.
29. J.W. Cahn, D. Shechtman y D. Gratias, *J. Mater. Res.* **1** (1986) 13.
30. P.J. Steinhardt (enviado a *Science*).
31. D. Shechtman y I. Blech, *Metall. Trans. A* **16** (1985) 1005.

32. P.W. Stephens y A.I. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1985) 1168.
33. P.W. Stephens y A.I. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 2331.
34. L. Pauling, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 365.
35. T.C. Lubensky, J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt, P.A. Bancel y P.A. Heiney, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1440.
36. J.E.S. Socolar, T.C. Lubensky y P.J. Steinhardt, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 3345.
37. P.J. Steinhardt, *Proceedings of the International Workshop on Quasicrystals*, Beijing, China (septiembre de 1987) (en prensa).
38. P.M. Horn *et al.* (Resultados sin publicar: la figura 4 de la referencia 30 resume parte de esos resultados.)
39. P. Guyot y M. Audier, *Phi. Mag. B* **52** (1985) 115.
40. P. Guyot, M. Audier y M. Lequette, *J. Physique C3-47* (1986) 389.
41. Y. Ma, E.A. Stern y C.E. Bouldin, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1611.
42. J.G. Pérez-Ramírez, R. Pérez, A. Gómez, L. Cota-Araiza, L. Martínez y M. José-Yacamán, *J. Mater. Res.* **2** (1987) 153.
43. N.K. Mohopadhyay, N. Thangaraj. K. Chattopadhyay y S. Ranganathan, *J. Mater. Res.* **2** (1987) 299.
44. R. Dubost, J.-M. Lang, M. Tanaka, P. Sainfort y M. Audier, *Nature* **324** (1986) 48.
45. W. Ohashi y F. Spaepen, resultados sin publicar (citados en la referencia 30).
46. D. Gratias, *La Recherche* **17** (1986) 788. La traducción del francés al castellano se publicó en: D. Gratias, *Mundo Científico* **61** (1986) 878. Uno de los mejores artículos de difusión acerca del concepto de cuasicristal. Además, es interesante su mención de que uno de los sistemas construidos por Pauling corresponde al quinto aproximante de una secuencia de aproximantes para un cuasicristal dado construida por D. Gratias y J.W. Cahn. Junto con este artículo destacan los citados en las referencias 12, 25 y 26, de gran carácter pedagógico.
47. J.M. Cabrera Trujillo, *Densidad local de estados electrónicos en redes de Penrose* (discusión detallada de la aplicación del algoritmo de Mackay tanto al par de rombos como al par cometa-dardo), tesis de Maestría, Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla, 1988.
48. T.C. Choy, *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 2915.
49. M. Kohmoto y B. Sutherland, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 2740.
50. T. Odagaki y D. Nguyen, *Phys. Rev. B* **33** (1986) 2184.
51. M. Kohmoto y B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 3849.
52. B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 3904.
53. V. Kumar y G. Athithan, *Phys. Rev. B* **35** (1987) 906.
54. J.D. Joannopoulos y F. Yndurain, *Phys. Rev. B* **10** (1974) 5136.
55. R.C. Kittler y L.M. Falicov, *Phys. Rev. B* **18** (1978) 2506.
56. J.B. Salzberg, C.E.T. Gonçalves da Silva y L.M. Falicov, *Phys. Rev. B* **14** (1976) 1314.
57. R.A. Barrio, F.L. Galeener y E. Martínez, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 1786.
58. F. Aguilera-Granja, F. Mejía-Lira, J.L. Morán-López y R.G. Barrera, *Phys. Rev. B* **36** (1987) 7342.
59. J.M. Cabrera-Trujillo, F. Mejía-Lira y J.L. Morán-López (en preparación).
60. B. Simon, *Adv. Appl. Math.* **3** (1982) 463 (y referencias ahí citadas).
61. S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand y H.J. Schellnhuber, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983) 1873.
62. A. Peres, *Phys. Rev. B* **27** (1983) 6493.
63. M. Kohmoto y Y. Oono, *Phys. Lett* **102 A** (1984) 145.
64. S. Ostlund y R. Pandit, *Phys. Rev. B* **29** (1984) 1394.
65. R.K.P. Zia y W.J. Dallas, *J. Phys. A* **18** (1985) L341.

66. Q. Niu y F. Neri, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 2057.
67. H. Ma, Y. Xu, C. Tsai, *J. Phys. C* **19** (1986) L823.
68. M. Kohmoto y J.R. Banavar, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 563.
69. C. Tang y M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 2041.
70. A. Mookherjee y V.A. Singh, *Phys. Rev. B* **34** (1986) 7433.
71. J.M. Luck y D. Petritis, *J. Stat. Phys.* **42** (1986) 289.
72. P. Villaseñor-González, F. Mejía-Lira y J.L. Morán-López, *Sol. State Comm.* **66** (1988) 1127; P. Villaseñor-González, F. Mejía-Lira y J.L. Morán-López, *Memorias del VII Congreso Nacional de Física de Superficies e Interfaces*, p. 66, editado por Arturo Morales, Sociedad Mexicana de Ciencias de Superficies y de Vacío A.C., México, 1987.
73. M. Gardner, *Miscelánea Matemática*, p. 156, Salvat Editores, Barcelona, España, 1986.
74. C.D. Olds, *Continued Fractions*, Random House, 1983.
75. *Idem.*, referencia 30, figura 3.
76. *Idem.*, referencia 26.
77. J. Todd, R. Martin, R. Clarke, K.M. Mohanty y J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 1157.
78. M.W.C. Dharma-wardana, A.H. MacDonald, D.J. Lockwood, J.-M. Baribeau y D.C. Houghton, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 1761.

**Abstract.** Some aspects of quasicrystals are revised. After a brief description of the proposed models of icosahedral solids and stress the fact that the experiments show that quasicrystals are a new state of condensed matter, a description is given of the Penrose tiles and the Fibonacci chain. Some results obtained for the electronic properties of given models of one- and two-dimensional quasicrystals are briefly described. In the two dimensional case emphasis is paid to the effects of the boundary conditions imposed when the quasicrystal is approximated by one of its portions. In the one-dimensional case the way to generate a hierarchy of approximations to the quasicrystal following the Fibonacci sequence is presented.