

TRANSICIONES DE FASE CUASICRISTAL-CRISTAL

M. TORRES - G. PASTOR - I. JIMENEZ - J. FAYOS

El reciente descubrimiento de algunas aleaciones cuya organización atómica se configura según las sutiles estructuras geométricas cuasiperiódicas ha provocado una excitante actividad investigadora bajo la fascinación de ensanchar el horizonte del conocimiento básico y con la fundada esperanza de poder encontrar nuevos materiales con exóticas propiedades de extraordinario interés en las aplicaciones tecnológicas.

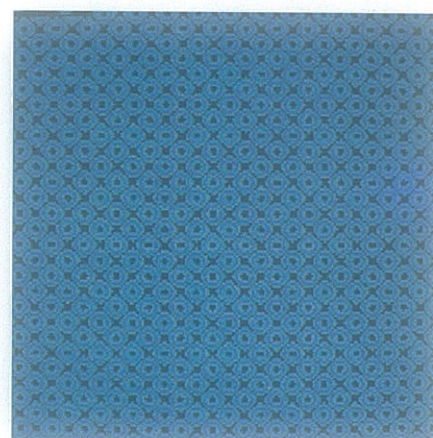
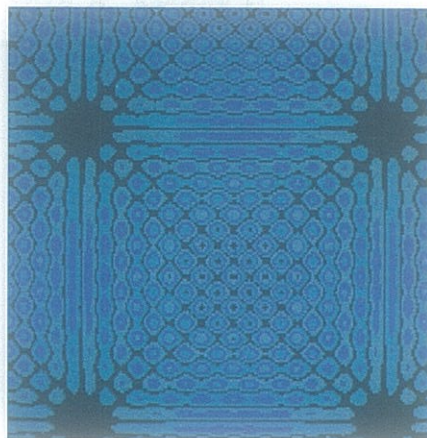
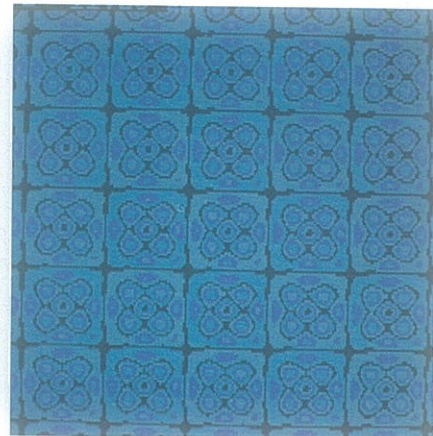
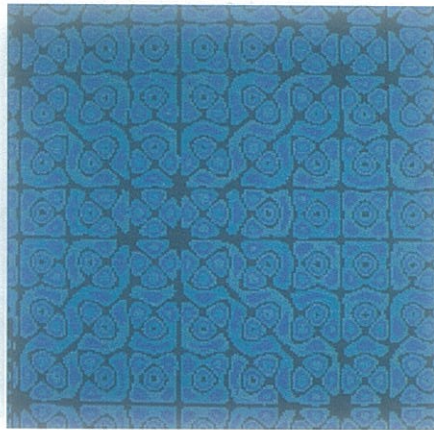
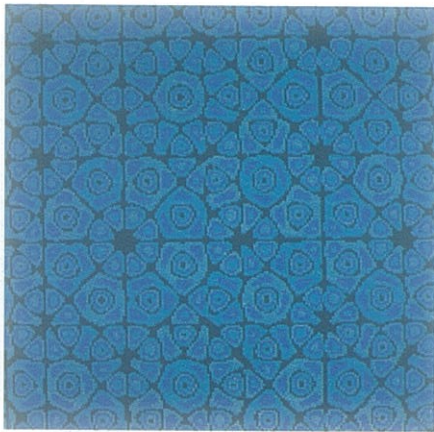
En el año 1984, Shechtman y sus colaboradores, al encontrar una aleación de Al-Mn que difractaba los electrones como lo haría un cristal (esto es, mostrando nítidos picos de Bragg), pero exhibiendo una perfecta, incontestable, simetría de orden 5, quebrantaban la presunción de Kepler acerca de la exclusión de la simetría quinaria del ámbito de la cristalografía. ¿Cómo era esto posible habida cuenta de que es, en efecto, imposible embaldosar el plano con pentágonos regulares o llenar el espacio ni con icosaedros ni con dodecaedros regulares? El ardid matemático, urdido por la naturaleza para burlar el genio de Kepler, lo había desvelado el cosmólogo inglés R. Penrose una década antes del hallazgo de la aleación mencionada, al descubrir sus ya universalmente famosos mosaicos aperiódicos pentagonales (4). Estos "rompecabezas" fueron rápidamente generalizados para el espacio, y en ellos el triacontaedro, poliedro descubierto por Kepler, irónicamente, juega un papel crucial. El crista-

lógrafo escocés A. L. Mackay, al conocer estas nuevas estructuras geométricas, predijo que las teselaciones tridimensionales de Penrose podían ser el soporte matemático para un nuevo estado de agregación de la materia.

La clave para resolver la anterior paradoja reside en el concepto de cuasiperiodicidad. Una estructura cuasiperiódica es la composición de un número finito de estructuras periódicas entre cuyos períodos existe alguna relación inconmensurable, esto es, regida por un número irracional. Lo que R. Penrose vislumbró por primera vez, y lo que otros matemáticos y físicos han esclarecido definitivamente, es que existen múltiples estructuras ordenadas que no son periódicas, sino cuasiperiódicas. En ellas aparecen secuencias de Fibonacci autosimilares, como las periódicas, mas no repetitivas. Dichas estructuras cuasiperiódicas se han interpretado como las proyecciones sobre los espacios bi y tridimensionales de estructuras periódicas con pendientes irracionales construidas en espacios con un número de dimensiones mayor que tres. La matemática implicada en el problema tiene que ver con algunas cuestiones básicas del álgebra lineal, de la teoría de números y de la teoría de grupos, y se está desarrollando en la actualidad con un ritmo creativo vertiginoso.

Otras muchas aleaciones que exhiben simetrías intrínsecas convencionalmente prohibidas ya han sido descubiertas

Manuel TORRES y Gerardo PASTOR son Doctores en Ciencias Físicas y colaboradores científicos del CSIC. Han trabajado en los campos de la Física de la Materia Condensada y del Electromagnetismo. Ismael JIMENEZ es Doctor en Ciencias Químicas, también es colaborador científico del CSIC, y ha trabajado en el campo de los Materiales Cerámicos. Estos tres autores también investigan en la actualidad en Criptografía. José FAYOS es Doctor en Ciencias Físicas, Profesor de Investigación del CSIC y Cristalógrafo.



Evolución de la función densidad desde una fase cuasicristalina octagonal hasta una fase cristalina cubica. Cuando el ángulo de giro del hiperplano es igual a $22,5^\circ$, se obtiene el cuasicristal. Cuando el ángulo disminuye hasta 0° , el cuasicristal evoluciona hasta el cristal.

desde el hallazgo inicial de Shechtman y de sus colaboradores. Los materiales que se conforman, según las citadas estructuras cuasiperiódicas, se denominan cuasicristales y constituyen un ejemplo de puente conceptual tendido desde el desorden de los materiales amorfos al encorsetado orden de los materiales cristalinos tradicionales. La nueva simetría local alrededor de los átomos de estos sólidos fundamenta la convicción generalizada entre la comunidad científica de que los cuasicristales han de poseer propiedades físicas específicas y relevantes. El interés de los mismos se centra, por ejemplo, en la búsqueda de nuevas aleaciones ligeras de elevada resistencia mecánica, para aplicaciones aeroespaciales; en la de materiales extraordinariamente "blandos", desde el punto de vista magnético, para su utilización como sensores, o en la de aleaciones de alta conductividad térmica, para aplicaciones específicas.

Sin embargo, para el estudio de las propiedades físicas características de los cuasicristales es imprescindible el conocimiento de las ubicaciones precisas de las distintas especies atómicas en las cuasirredes. Infortunadamente, la decoración atómica de las cuasirredes es

una cuestión aún hoy abierta y que dista mucho de haber alcanzado un estado del arte satisfactorio. Para iluminar dicho problema es de gran interés el estudio de la conexión que existe entre las fases cuasicristalinas y las fases cristalinas de similar composición que están relacionadas con ellas, las cuales son de estructura mejor conocida. Nuestro grupo viene investigando desde hace algún tiempo en el campo de los estados intermedios y de las transiciones de fase cuasicristal-cristal, y ha desarrollado un sencillo modelo matemático que conecta todas las fases cuasicristalinas conocidas con las fases cristalinas relacionadas con ellas. Estos trabajos han sido presentados por A. L. Mackay en la revista *Nature* (2).

La función densidad de los cuasicristales se describe mediante un desarrollo en serie, de Fourier, extendido a las proyecciones sobre el espacio ordinario, bidimensional o tridimensional, de los vectores de la red recíproca correspondiente en el hiperespacio desde el cual se proyecta. A cada vector, bidimensional o tridimensional, del espacio real se le asocia un vector en el pseudoespacio, que es el complemento ortogonal del espacio real respecto del hiperespacio

de proyección elegido. Las fases libres de la función densidad se generan mediante translaciones en el hiperespacio de proyección. Si la función densidad se toma como parámetro de orden, estas fases libres se corresponden con los modos hidrodinámicos de ruptura de simetría, que conservan la energía libre del cuasicristal, en una teoría del tipo Landau. El número de fases libres independientes coincide con el número de dimensiones del hiperespacio de proyección. Existen dos tipos de modos hidrodinámicos, o variables de ruptura de simetría, muy diferentes. El primero se genera mediante translaciones en el espacio real. Es el denominado modo fonón, que se propaga y se relaja muy rápidamente. El segundo tipo de modo se genera mediante translaciones en el pseudoespacio ortogonal y se denomina modo fasón. Dicho modo es difusivo y queda "congelado" en el cuasicristal. Ciertos campos de acoplamiento fonón-fasón pueden variar ligeramente la energía libre, pero pueden alterar muy profundamente las estructuras de los cuasicristales. Nuestro grupo ha demostrado que la rotación del hiperplano donde se proyecta o con el que se secciona, en el hiperespacio desde el cual se proyecta

o que se secciona, equivale formalmente, en todos los casos conocidos, al campo de acoplamiento fonón-fasón, que describe los resultados experimentales observados relativos a las posibles transiciones de fase cuasicristal-cristal. Nuestro método describe los campos de fonón y de fasón a partir de la supuestamente conocida matriz de rotación en el hiperespacio p-dimensional donde trabajamos. Para determinar la matriz de rotación buscamos estrellas de vectores variables que preserven el teorema de Hadwiger (3) y después determinamos heurísticamente su complemento ortogonal. El teorema de Hadwiger nos garantiza que durante la transformación la estrella de vectores elegida es la proyección de la base canónica del hiperespacio.

Nuestra técnica en esencia es la que a continuación se describe. Sea la matriz ortogonal

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} P_{\parallel}(\theta) \\ P_{\perp}(\theta) \end{pmatrix} \quad (1)$$

una matriz de rotación en el hiperespacio p-dimensional E^p , donde las submatrices de proyección ortogonal $P_{\parallel}$ y $P_{\perp}$ son $n \times p$ y $m \times p$ dimensionales, respectivamente, $p=n+m$, $n=2$ ó 3 . La rotación R , actuando sobre la base canónica de E^p .

$$Re_i = (P_{\parallel} e_i, P_{\perp} e_i) = (u_{\parallel i}, u_{\perp i}), i=1, \dots, p, \quad (2)$$

separa E^p en el espacio físico E^n ($n=2$ ó 3) y en el complemento ortogonal pseudoespacial E^m . Esto es, $E^p = E^n \oplus E^m$. Suponemos que para $\theta = \theta_0$, R induce una proyección desde la red cúbica de E^p , en E^n , la cual genera el cuasicristal "standard" imperturbado. Para θ variable, R cambia la orientación del hiperplano sección n-dimensional (E^n) en E^p , lo que representa un cierto acoplamiento fonón-fasón. Para describir este acoplamiento expresamos la densidad local $\rho(r)$, $A, r \in E^n$ como una simple suma de p ondas de densidad, lo que es suficiente para estudiar la evolución de la simetría:

$$\rho(r) \propto \sum_{i=1}^p \cos(r \cdot u_{\parallel i}) = w \cdot u^Q \cdot \perp_i = \sum \cos(r \cdot u_i), \quad (3)$$

donde el superíndice Q indica $\theta = \theta_0$, $v=v(r)$ es el campo de fonón entre E^n y $w=w(r)$ es el campo de fasón en E^m . Los campos de fonón y de fasón quedan completamente definidos, para cada valor del ángulo θ , por medio de la ecuación matricial

$$(v, w)R(\theta_0) = r[P_{\parallel}(\theta) - P_{\parallel}(\theta_0)] \quad (4)$$

que describe un sistema de ecuaciones lineales de Cramer.

La función densidad está definida en el espacio real. El programa de computación la secciona a intervalos regulares y asigna a cada intervalo del valor de la función un color característico. El mapa de colores describe la simetría de la función. A partir de la función densidad se puede calcular la energía libre en un formalismo de ondas de densidad.

Como ilustración de lo expuesto, la figura muestra una secuencia que describe la evolución continua desde una fase cuasicristalina octogonal hasta la fase cúbica relacionada con ella. Nuestras simulaciones mediante ordenador coinciden con las imágenes reales experimentalmente obtenidas por microscopía electrónica de alta resolución o con el avanzado microscopio de efecto túnel. La extraña belleza de estas imágenes habla por sí sola del desafío y de la promesa que representan los cuasicristales.

BIBLIOGRAFIA

1. M. GARDNER, Sci. Amer. 236, 110 (1977).
2. A. L. MACKAY, Nature 344, 21 (1990).
3. H. S. M. COXETER, *Regular Polytopes*, 3ª ed. Dover, New York, 1973.

ATENCION

AL NUMERO 90 DE LA REVISTA DE LA SNE

El número 90, correspondiente al mes de septiembre, abordará el MANTENIMIENTO como tema monográfico y presentará un análisis de la jornada que, sobre OPINION PUBLICA, organizó recientemente la Sociedad Nuclear Española.

Su distribución especial en la XVI REUNION ANUAL, que tendrá lugar en Oviedo el próximo mes de octubre, acentúa su interés como vehículo publicitario.

Reserve, a la mayor brevedad, el espacio más adecuado.