



FACULTAD DE MATEMÁTICAS
Departamento de Análisis Matemático

CUASICRISTALES

Difracción y definición matemática del conjunto de puntos

José García Fernández
Ignacio Gómez Martínez
Fernando Cañizares Romero
Daniel García Ordóñez
Antonio Navarro Cuesta

Asignatura: Teoría Analítica de Números

Tutor: Juan Arias de Reyna

Índice

1. Introducción	1
2. Problema a tratar	5
2.1. Construcción de la definición	5
2.2. Cálculo del radio y de las circunferencias	5
2.3. Primeras definiciones	7
3. Definición final del conjunto $\{a_n\}$	7
4. Comprobación empírica de la definición	7
5. Conclusiones	11
5.1. Cuestiones abiertas y respuestas	11
5.2. Observación sobre la teoría de Galois	12
A. Esquema del algoritmo de intersección de rectas	12
Bibliografía	13

Resumen

En este trabajo damos una definición matemática del conjunto de puntos de difracción observados en imágenes de cuasicristales de aleación Al-Mn. El modelo se basa en círculos concéntricos de radios ϕ^n (razón áurea) en el plano complejo y las intersecciones de rectas que conectan puntos sobre dichos círculos. Verificamos empíricamente la coincidencia con el patrón de difracción real mediante simulaciones en Mathematica.

Palabras clave: cuasicristales, razón áurea, difracción, simetría pentagonal, plano complejo.

1. Introducción

Los cristales son disposiciones ordenadas de átomos y presentan simetrías por traslación y rotación. Para estudiar su estructura se usa la *difracción*: cuando un haz de electrones o rayos X incide sobre la muestra, las ondas se dispersan en direcciones fijadas por la periodicidad atómica. El patrón resultante—puntos brillantes sobre fondo oscuro—revela las simetrías del material; cada punto corresponde a una dirección privilegiada de dispersión (pico de Bragg). El *teorema de restricción cristalográfica* establece que las simetrías de rotación de un cristal se limitan a los órdenes 2, 3, 4 y 6 (véase, por ejemplo, [1]). La idea central de la demostración es que una rotación de ángulo $2\pi/n$ en el plano tiene polinomio mínimo de grado $\varphi(n)$ (función de Euler) sobre \mathbb{Q} ; para que exista una red periódica 2D invariante, ese grado debe ser 1 o 2, lo que solo ocurre para $n = 2, 3, 4, 6$.

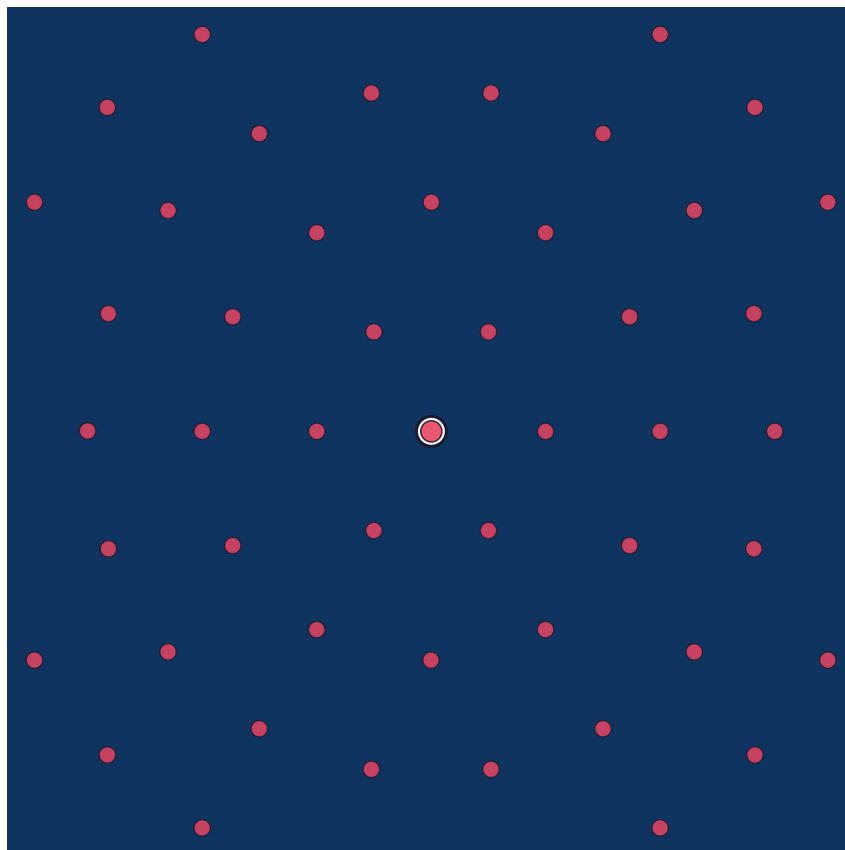


Figura 1: Patrón de difracción electrónico de un cristal periódico. La distribución de puntos brillantes describe la disposición de acuerdo con un patrón hexagonal.

Sin embargo, en 1984 se descubrieron los llamados **cuasicristales** [2]. Shechtman, Blech, Gratias y Cahn publicaron figuras de difracción por electrones de una aleación $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ que presentaban una difracción con puntos brillantes muy definidos pero que claramente tenían *simetría pentagonal*—dicho descubrimiento hizo que Shechtman (figura 3) fuera galardonado con el Premio Nobel de Química en 2011. La figura 2 muestra este patrón característico (véase [3] para una introducción a los cuasicristales).

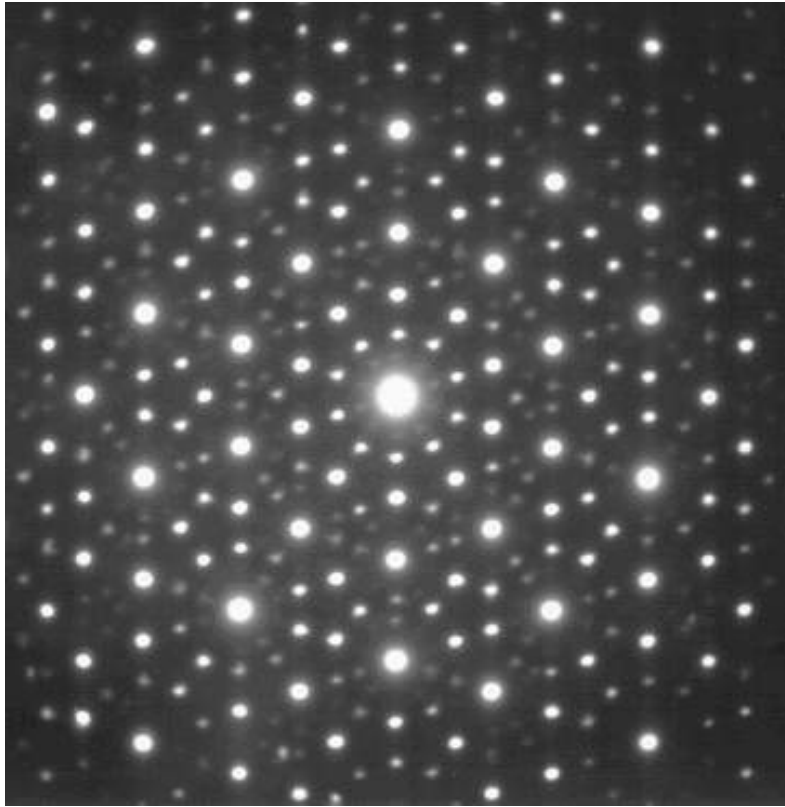


Figura 2: Difracción de un cuasicristal, donde apreciamos simetría pentagonal, imposible en el caso de los cristales periódicos.



Figura 3: Dan Shechtman (1941–2023), descubridor de los cuasicristales y Premio Nobel de Química 2011.

En este trabajo damos una definición matemática del conjunto de puntos de difracción observados en las imágenes de cuasicristales, basada en la geometría del plano complejo y la razón áurea ϕ . Construimos el modelo a partir de círculos concéntricos de radios ϕ^n y las intersecciones de rectas que los conectan, verificando empíricamente la coincidencia con el patrón real.

Notación

Símbolo	Significado
ϕ	Razón áurea $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$
$\{a_n\}$	Conjunto de puntos de difracción
$P_{n,k}$	Punto k del círculo n : $\phi^{n-1}e^{i\pi k/5}$
r_{m,n,k_1,k_2}	Recta secundaria (definición en la ec. 3.1)
$\langle v \rangle$	Subespacio afín de dirección v

2. Problema a tratar

Nuestro problema será dar una **definición matemática** del conjunto $\{a_n\}$ de puntos de difracción. Antes de empezar, podemos realizar algunas observaciones:

- El **punto central** de la imagen tiene mayor luminosidad que el resto de puntos (debido al proceso de difracción).
- Observamos que hay bastantes puntos que se agrupan en **pentágonos**.
- Hay **circunferencias**, cada vez de mayor radio (formadas por diez puntos cada una), alrededor del punto central.
- Vamos a construir un modelo matemático tomando la imagen de manera **infinita**, no como un trozo de plano finito.

2.1. Construcción de la definición

Tomamos el origen en el punto central de la fotografía y consideramos que la distancia a la circunferencia más cercana es 1.

En el plano complejo, los diez puntos de la primera circunferencia vienen dados por

$$P_{1,k} = e^{2\pi ik/10} = e^{i\pi k/5}, \quad k = 0, \dots, 9. \quad (2.1)$$

Los diez puntos corresponden a las raíces décimas de la unidad: la simetría pentagonal exige ángulos de $\pi/5$, y al considerar ambos sentidos en cada eje se obtienen 10 direcciones.

Surge la pregunta: ¿cuál es la distancia entre circunferencias consecutivas? ¿Existe alguna relación de proporcionalidad?

2.2. Cálculo del radio y de las circunferencias

Los puntos de la segunda circunferencia son idénticos a los de la primera salvo el radio:

$$P_{2,k} = r e^{i\pi k/5}, \quad k = 0, \dots, 9. \quad (2.2)$$

Nuestro objetivo es hallar el radio r . Para ello, determinamos un punto de la segunda circunferencia como la intersección de dos rectas conocidas (formadas por puntos de la primera circunferencia) y calculamos el módulo de dicho punto (véase la figura 4).

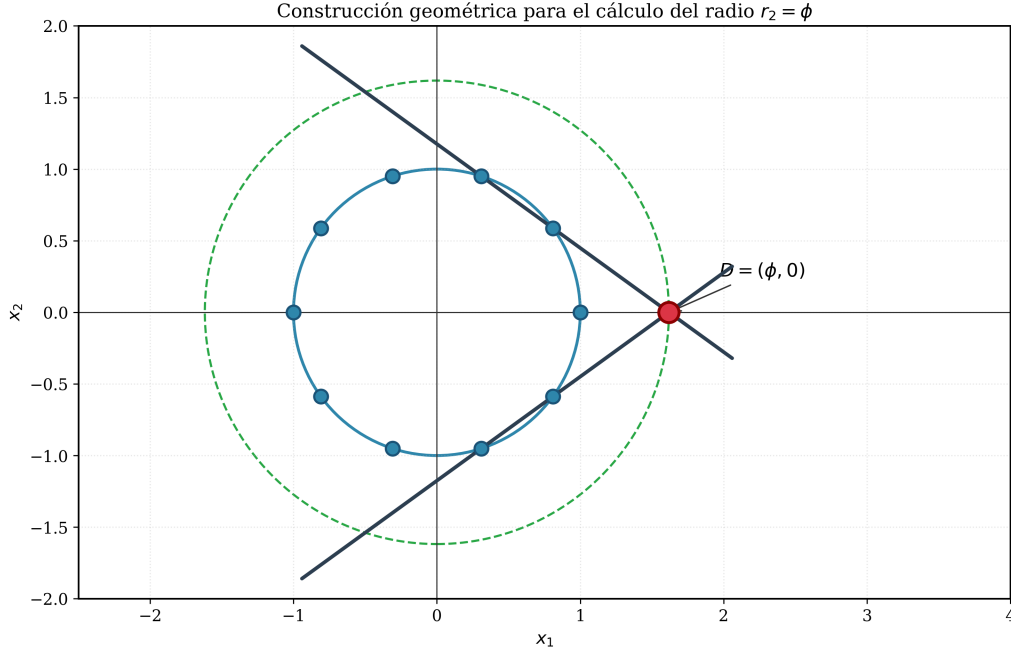


Figura 4: Esquema geométrico para el cálculo del radio de la segunda circunferencia.

Las ecuaciones paramétricas de la recta son

$$\begin{cases} x_1 = \cos\left(\frac{\pi}{5}\right) + \lambda \left[\cos\left(\frac{\pi}{5}\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) \right], \\ x_2 = \sin\left(\frac{\pi}{5}\right) + \lambda \left[\sin\left(\frac{\pi}{5}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{5}\right) \right]. \end{cases} \quad (2.3)$$

Para el punto sobre el eje real imponemos $x_2 = 0$:

$$0 = \sin\left(\frac{\pi}{5}\right) + \lambda \left[\sin\left(\frac{\pi}{5}\right) - \sin\left(\frac{2\pi}{5}\right) \right]. \quad (2.4)$$

Despejando, $\lambda = -\frac{\sin(\pi/5)}{\sin(\pi/5) - \sin(2\pi/5)}$. Usando los valores

$$\sin\left(\frac{\pi}{5}\right) = \sqrt{\frac{5 - \sqrt{5}}{8}}, \quad \sin\left(\frac{2\pi}{5}\right) = \sqrt{\frac{5 + \sqrt{5}}{8}}, \quad (2.5)$$

$$\cos\left(\frac{\pi}{5}\right) = \frac{\sqrt{5} + 1}{4}, \quad \cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) = \frac{\sqrt{5} - 1}{4}, \quad (2.6)$$

obtenemos

$$\lambda = \frac{\sqrt{5} + 1}{2}, \quad x_1 = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} = \phi, \quad (2.7)$$

donde $\phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}$ es la *razón áurea*. Nótese que ϕ satisface

$$\phi^2 = \phi + 1, \quad (2.8)$$

lo que explica su aparición natural en esta construcción (el decágono regular inscribe radios en proporción áurea). Los radios $r_n = \phi^{n-1}$ siguen además la recurrencia de Fibonacci: $\phi^n = \phi^{n-1} + \phi^{n-2}$.

Por tanto, $r_2 = \phi$.

Para el segundo radio, análogamente se obtiene $r_3 = \phi^2$. En general,

$$r_n = \phi^{n-1} \quad \text{para } n \geq 1. \quad (2.9)$$

2.3. Primeras definiciones

- **Círculos principales:** los círculos de 10 puntos observables en la figura.
- **Punto principal:** cualquier punto perteneciente a un círculo principal.
- **Rectas principales:** rectas formadas por dos puntos principales de un mismo círculo.
- **Rectas secundarias:** rectas formadas por dos puntos principales cualesquiera.

3. Definición final del conjunto $\{a_n\}$

Los puntos de difracción que observamos en la imagen corresponden a las *intersecciones* de rectas secundarias: allí donde varias rectas se cruzan, la intensidad de la difracción es mayor. Definimos la recta afín que pasa por $\phi^m e^{i\pi k_1/5}$ y tiene la dirección del vector $\phi^m e^{i\pi k_1/5} + \phi^n e^{i\pi k_2/5}$ como

$$r_{m,n,k_1,k_2} = \phi^m e^{i\pi k_1/5} + \langle \phi^m e^{i\pi k_1/5} + \phi^n e^{i\pi k_2/5} \rangle, \quad (3.1)$$

donde $\langle v \rangle$ denota el subespacio afín de dirección v (la recta que pasa por el origen con dirección v , trasladada al punto indicado), y $m, n \in \mathbb{Z}$, $k_1, k_2 \in \{0, 1, \dots, 9\}$ con $k_1 \neq k_2$.

El conjunto $\{a_n\}$ de puntos de difracción es la unión de todas las intersecciones de pares de rectas secundarias no paralelas:

$$\{a_n\} = \left\{ r_{m,n,k_1,k_2} \cap r'_{m',n',k'_1,k'_2} \right\}, \quad (3.2)$$

con la condición $r_{m,n,k_1,k_2} \not\parallel r'_{m',n',k'_1,k'_2}$.

4. Comprobación empírica de la definición

Hemos dado una definición del conjunto de puntos de difracción; ahora verificamos si se asemeja a la realidad. Para ello utilizamos *Mathematica* (Wolfram).

El primer programa no se ajustaba completamente a la definición, por lo que añadimos más puntos (Programa 2). La figura 5 muestra la primera aproximación y la figura 6 el modelo refinado. En la figura 7 mostramos únicamente los puntos, sin las rectas, para apreciar mejor la estructura. La figura 8 compara nuestro modelo con la imagen real.

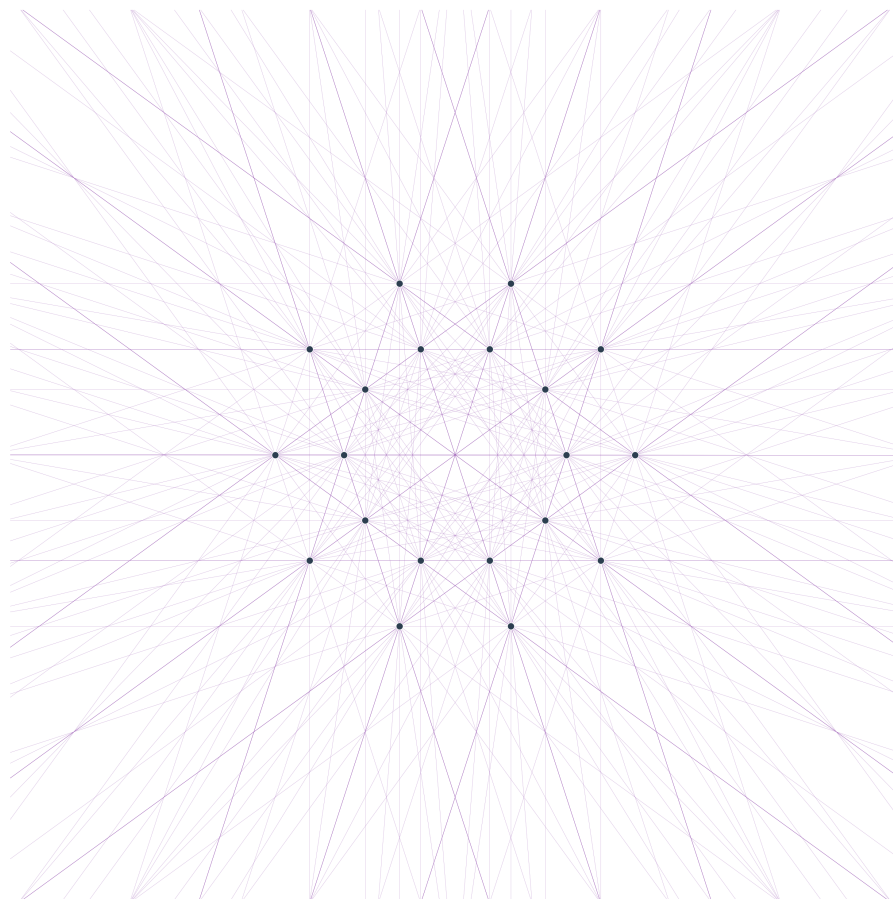


Figura 5: Simulación 1: primera aproximación al patrón de difracción.

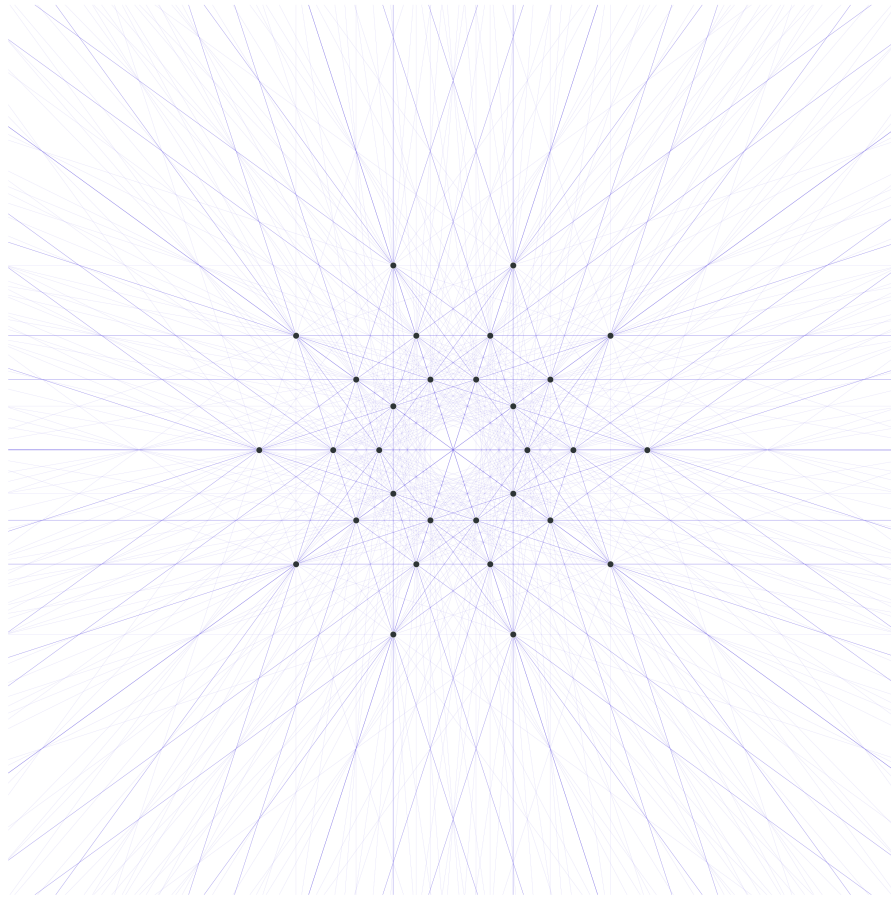


Figura 6: Simulación 2: modelo refinado con mayor número de puntos.

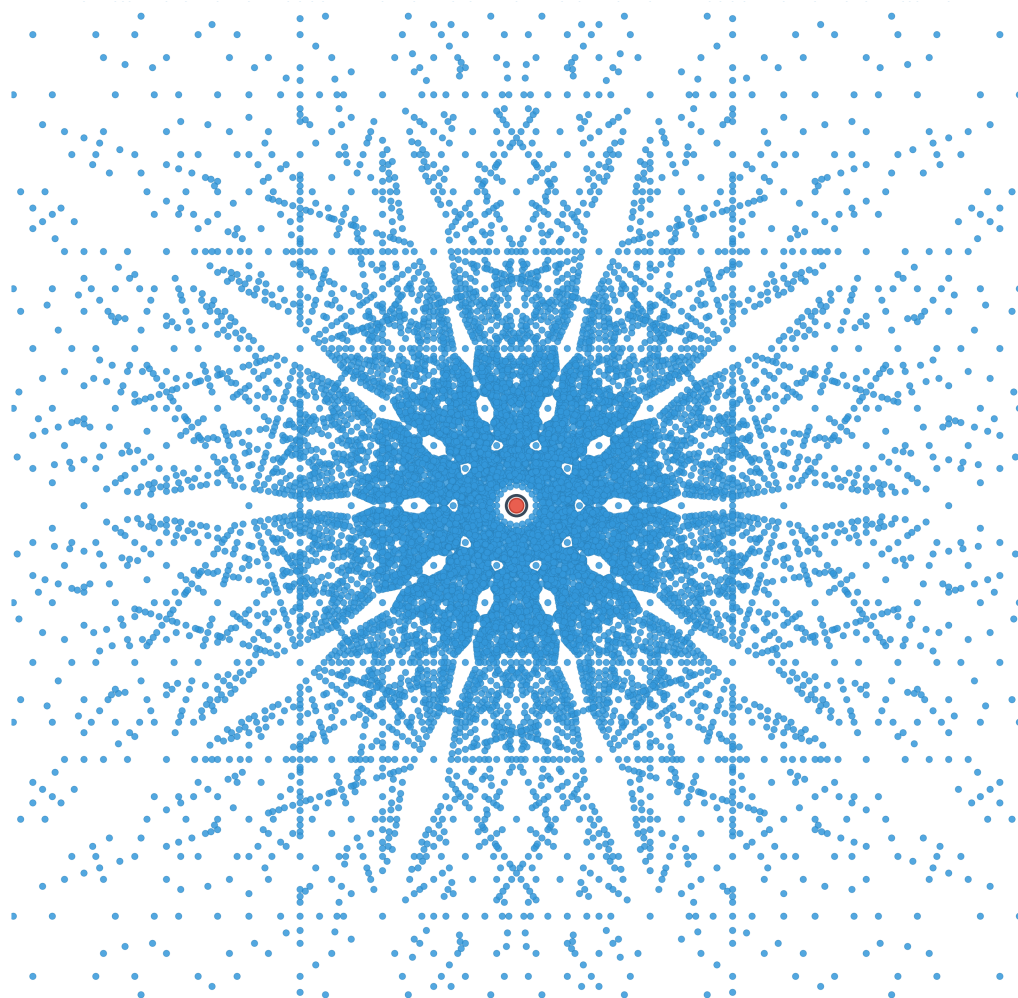


Figura 7: Patrón de puntos obtenido con nuestra definición (sin rectas auxiliares).

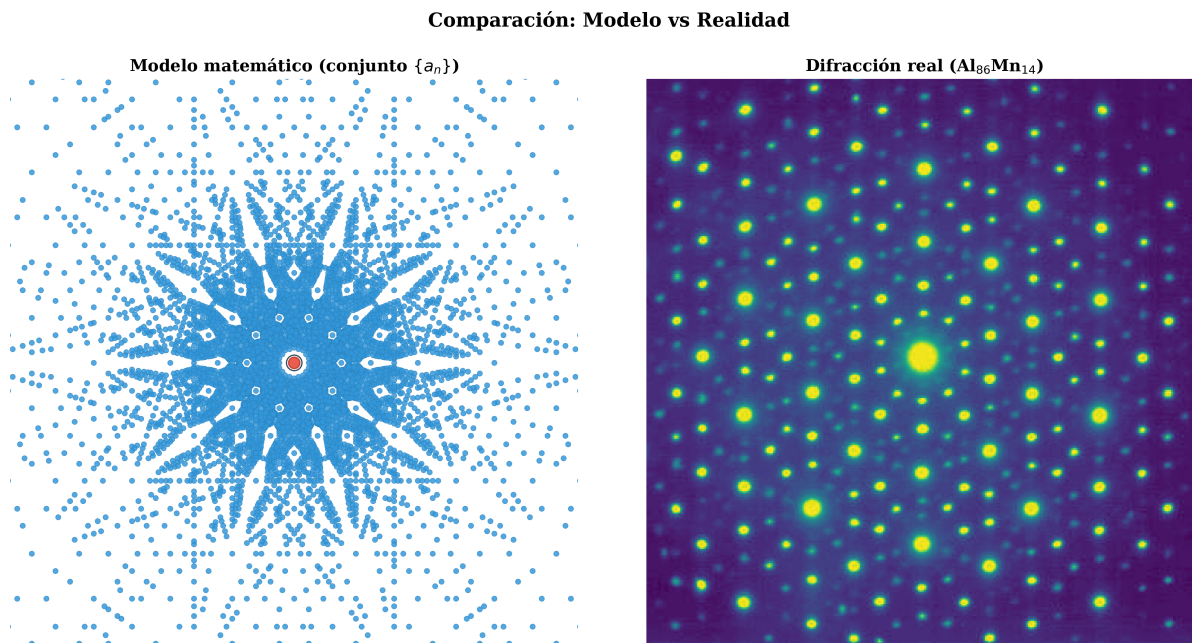


Figura 8: Comparación entre el modelo matemático y la difracción real. Se observa la coincidencia de los pentágonos característicos.

5. Conclusiones

Aunque nuestro modelo se asemeja a la realidad y cumple las observaciones de la sección 2, surgieron varias cuestiones que merecen respuesta.

5.1. Cuestiones abiertas y respuestas

¿Hay puntos en la foto original que no detectamos?

Sí. Puede haber puntos demasiado débiles por el ruido o la resolución experimental, o que queden fuera del encuadre. El modelo matemático genera más puntos de los que se aprecian en la imagen.

¿Es el conjunto de puntos de difracción finito?

Depende del alcance del modelo. Si consideramos solo un número finito de círculos principales, el conjunto de intersecciones es finito. Si extendemos el modelo a todos los círculos ($n = 0, 1, 2, \dots$), hay infinitas rectas secundarias y el conjunto de intersecciones es infinito numerable, aunque discreto, como los picos de Bragg de un cuasicristal.

¿Por qué los puntos tienen distinta luminosidad?

Según nuestra definición, los puntos más brillantes son aquellos por los que se intersecan más rectas. Esta es una *analogía simplificada* de la física de la difracción: en la realidad, la intensidad en un pico de Bragg depende del factor de estructura; en nuestro modelo geométrico, el número de rectas concurrentes juega un papel análogo.

5.2. Observación sobre la teoría de Galois

La aparición de ϕ y la simetría pentagonal no es casual desde el punto de vista algebraico. El cuerpo $\mathbb{Q}(\sqrt{5})$ contiene a ϕ y está relacionado con las raíces décimas de la unidad. El teorema de restricción cristalográfica puede formularse en términos del grado de la extensión $\mathbb{Q}(\zeta_n)$ sobre \mathbb{Q} : para $n = 5$ (o 10), ese grado es 4, lo que implica que una red periódica con simetría pentagonal requeriría al menos 4 dimensiones. Los cuasicristales evitan esta restricción al no ser periódicos en el sentido clásico.

En resumen, hemos dado una definición matemática explícita del conjunto de puntos de difracción de cuasicristales con simetría pentagonal, basada en la geometría del plano complejo y la razón áurea. El modelo reproduce el patrón observado experimentalmente y ofrece una perspectiva algebraica que conecta ϕ , la simetría de orden 5 y la restricción cristalográfica. Futuras extensiones podrían incluir el estudio de la intensidad real de los picos o la generalización a otros órdenes de simetría.

Agradecimientos

Agradecemos a nuestro tutor, Juan Arias de Reyna, por su orientación y sugerencias durante la elaboración de este trabajo.

A. Esquema del algoritmo de intersección de rectas

Para generar el conjunto $\{a_n\}$ según la definición de la sección 3, el algoritmo procede como sigue:

1. **Generar círculos principales.** Para cada $n = 1, \dots, N_{\text{máx}}$, calcular los 10 puntos $P_{n,k} = \phi^{n-1} e^{i\pi k/5}$, $k = 0, \dots, 9$.
2. **Generar rectas secundarias.** Para cada par de puntos (P_{m,k_1}, P_{n,k_2}) con $k_1 \neq k_2$, construir la recta afín que pasa por P_{m,k_1} con dirección $P_{m,k_1} + P_{n,k_2}$ (según la ec. 3.1).
3. **Calcular intersecciones.** Para cada par de rectas secundarias no paralelas, resolver el sistema lineal 2×2 para obtener el punto de intersección.
4. **Filtrar y representar.** Eliminar duplicados (puntos muy cercanos) y representar los puntos en el plano complejo.

El parámetro $N_{\text{máx}}$ controla el número de círculos considerados; a mayor $N_{\text{máx}}$, más puntos se generan y la imagen se aproxima mejor al modelo infinito.

Referencias

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks/Cole, 1976.
- [2] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), 1951–1953.
- [3] C. Janot. *Quasicrystals: A Primer*. 2nd ed. Oxford University Press, 1994.