

# Introducción a la geometría de los cuasicristales

Departamento de Álgebra, Geometría y Topología (AGyT)

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad de Ciencias Matemáticas



## TRABAJO DE FIN DE GRADO

**Alejandro Ramírez Rodríguez**

Tutora: Celia Martínez Ontalba

Doble Grado en Ingeniería Informática y Matemáticas

Curso académico 2021-2022

Madrid, 30 de junio de 2022



Esta obra está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento 4.0 Internacional.

## **Agradecimientos**

Quisiera mencionar en primer lugar a mi tutora, Celia Martínez Ontalba, por todo su esfuerzo, apoyo y atención a lo largo del curso. Su implicación ha sido ejemplar, así como todos sus consejos y observaciones. Le deseo lo mejor, tanto a nivel profesional como personal, pues os aseguro que lo merece.

A mi familia y amigos, eternamente agradecido. Como la periodicidad a los cristales, sin vosotros nada tendría sentido.

Y, por último, a todos los profesores de la Universidad. En mi memoria quedan los que hicieron gala de una admirable dedicación por la enseñanza, transmitiendo su pasión y motivando a los alumnos. Enhorabuena por vuestro trabajo.

## Objetivos

A la hora de escribir este documento, se han tenido en cuenta tres objetivos principales: dar a conocer el mundo de la cristalografía, profundizar en la descripción geométrica de los cuasicristales y mostrar que aún existen campos de investigación abiertos en las matemáticas.

El primero está enfocado en los lectores que desconocían esta rama de la ciencia. Se introduce la teoría de la cristalografía desde varios puntos de vista: histórico, físico y matemático. Pese a ser un trabajo de índole matemática, es importante captar la atención del lector, tratando de explicar los orígenes y el por qué de esta teoría, que procede de la observación de fenómenos en la naturaleza.

En cuanto al segundo objetivo, es el núcleo del trabajo. Dentro de la teoría de la cristalografía se coordinan muchas ramas de las matemáticas. En el documento se presentan algunas, aunque tan solo se detalla la basada en la geometría de las estructuras. Se sigue el formalismo de las fuentes consultadas, incluyendo múltiples demostraciones y ejemplos. Por cuestión de espacio no se han podido detallar todas las demostraciones, pero en esos casos se citan las referencias de procedencia.

Los cuasicristales fueron descubiertos a finales del s.XX. Hasta ese momento se creía completo y cerrado el paradigma cristalográfico, en el que por supuesto no tenían cabida los cuasicristales. Este documento es un claro ejemplo de cómo funciona la ciencia, y de qué aún nos queda muchísimo por conocer. Desde el punto de vista matemático, el descubrimiento originó numerosas vías de investigación. A día de hoy, pese a los enormes esfuerzos, aún no se ha desarrollado un modelo completo de los cristales.

## Metodología

La metodología del trabajo está totalmente basada en la lectura de libros y artículos. La mayoría están centrados en cristalografía, aunque algunos otros eran necesarios para comprender bien las herramientas matemáticas que se emplean. En general son fuentes extensas, de gran profundidad conceptual y que recaban mucha información. Mencionar que al ser un campo abierto, existe una gran diversidad de opiniones y teorías, sobre todo en torno a las definiciones formales. Por lo tanto, he tratado de ser sensato con las afirmaciones, consultando múltiples fuentes y combinando los conocimientos adquiridos en ellas.

Gran parte de la literatura me ha sido facilitada por mi tutora. Hemos intercambiado muchos correos sobre dudas y observaciones, que han sido indispensables para la elaboración del documento. A lo largo de todo el curso he ido entregando borradores y ella los ha ido corrigiendo de forma detallada, con enorme celeridad.

En lo que a mí respecta, dividiría en tres etapas el ciclo de vida de este proyecto. Una primera, a modo de introducción, pues mis conocimientos sobre cristalografía brillaban por su ausencia. Consulté fuentes aportadas por mi tutora y otras que busqué por mi cuenta. También vi varios vídeos en Youtube, de carácter divulgativo e incluso artístico. La segunda etapa se centró exclusivamente en los aspectos matemáticos de la teoría de la cristalografía, y en particular de los cuasicristales. Escribí varios bocetos cortos, centrados en apartados independientes. Por último, en la tercera fase tuvo lugar la elaboración de esta memoria.

## Abstract

Quasicrystals were discovered in 1982. Since then, mathematicians, physicists and crystallography experts have cooperated in order to decipher the enigmas related to this new materials. Countless lines official research have emerged, trying to model their atomic structure. This document is focused on the geometric perspective, not only about quasicrystal's quasicrystals structure, but also on crystals in general.

This enjoyable journey through the crystallography theory begins with an historical introduction. It starts at the earliest stages, covering the most remarkable events, ideas and theories. Given that quasicrystals were “forbidden” until the huge discovery in 1982, this introduction is based on describing how perfect crystals were modelled through history. This chapter intends to be purely informative, as well as accessible for people with little mathematical knowledge. However, the next chapters are developed from a mathematical perspective.

The core of this document are chapters 2 and 3. Both try to explain the most important concepts behind crystal and quasicrystal structures, introducing theorems and proofs. Although they are focused on the geometric aspects, some diffraction's asserts are presented. This help readers to understand why some characterizations appear in this document. Specifically, chapter 2 shows crystal concepts in general, such as long range order or periodicity. Many essential points sets, which preserve some of this properties, are introduced as well. For instance, Meyer sets, Delone sets or lattices. This chapter ends with the definition of perfect crystals and the famous crystallographic restriction theorem.

In regards to chapter 3, quasicrystals are presented showing the properties shared with perfect crystals and their differences. Points sets described before are also important in this chapter. In fact, quasicrystals can be obtained as special projections of lattices. This method is called cut and project method and the resulting sets are named model sets. Readers will understand why these sets emerge in this theory. Two examples complete this chapter, in order to put into practice the theoretical development.

Last but not least, chapter 4 treats aperiodic tilings. They were developed before 1982 discovery. Nevertheless, their narrow relation with quasicrystals and model sets is the main reason why they are succinctly presented. The formalism followed in the previous chapters is slightly relaxed, especially describing two different ways of obtaining tilings: inflation and matching rules. Some famous examples are presented, like Penrose's tilings.

To sum up, this document is focused on describing geometrical aspects of crystals and specifically of quasicrystals, as well as some ways of obtaining them.

**Key words:** Crystals, quasicrystals, long range order, periodicity (non-periodicity), rotational symmetries, lattices, model sets, diffraction patterns.

# Índice

<b>1. Introducción histórica</b>	<b>4</b>
<b>2. Cristales</b>	<b>9</b>
2.1. Retículos, conjuntos de Delone y Meyer . . . . .	9
2.2. Definición de cristal perfecto . . . . .	13
2.3. Teorema de la restricción cristalográfica . . . . .	15
<b>3. Cuasicristales</b>	<b>20</b>
3.1. Conjuntos Modelo . . . . .	21
3.2. Ejemplos de conjuntos modelo . . . . .	25
<b>4. Teselaciones aperiódicas</b>	<b>30</b>
4.1. Método de proyección . . . . .	31
4.2. Reglas de coincidencia . . . . .	35
4.3. Inflación . . . . .	36
<b>Bibliografía</b>	<b>39</b>

## 1. Introducción histórica

En 1982 Daniel Shechtman descubrió un material que rompió los axiomas de la teoría cristalográfica [1]. Este hallazgo fue recompensado con el premio Nobel de Química en el año 2011. El material en cuestión era una aleación de aluminio y manganeso cuyo patrón de difracción presentaba puntos brillantes. Hasta aquí nada extraño, pues un patrón de difracción de estas características evidencia un **orden de largo alcance** en la estructura del material y los cristales por definición tenían estructura periódica. Hasta ese momento se creía que orden era sinónimo de simetría traslacional en tres direcciones independientes, es decir, **periodicidad**. Sin embargo, la peculiaridad de ese patrón de difracción es que reflejaba una simetría icosaédrica, totalmente incompatible con una estructura periódica.

El material parecía un artefacto propio de la brujería, que por supuesto no tenía cabida en el modelo matemático de los cristales. Antes de adentrarnos en las transformaciones que sufrió la cristalografía tras este descubrimiento, conozcamos las raíces de esta teoría, que aún múltiples ramas de las matemáticas y está íntimamente ligada a la observación de la naturaleza.

### Preliminares de la cristalografía

Hasta el s.XVII no existía ninguna teoría cristalográfica. Anteriormente los cristales tenían un valor económico elevado por su belleza y sus supuestas propiedades mágicas, pero no suscitaban ningún interés matemático sus formas y geometrías. Clasificarlos tampoco parecía un asunto importante en aquella época. Sin embargo, sí existían otras ramas del conocimiento científico que estaban relacionadas con la cristalografía: el estudio de los átomos. Conocer de qué estaba compuesta la materia era y sigue siendo uno de los mayores retos de la humanidad. Incluso algunos filósofos de la antigua Grecia elaboraron modelos sobre las partículas que conforman la materia y cómo se unen entre sí.

Platón fue el primero en desarrollar una teoría “atómica”, relacionando cinco poliedros regulares con cada uno de los cuatro *elementos*: tierra, aire, fuego y agua; y el cosmos. Los cinco poliedros regulares son el tetraedro, el cubo, el octaedro, el icosaedro y el dodecaedro. Para los griegos, estos tenían un significado especial. Fueron capaces de entender la dualidad entre el cubo y el octaedro, así como entre el icosaedro y el dodecaedro. Se utilizaron en muchas teorías de la época, por grandes filósofos como el mencionado Platón, o por históricos matemáticos como Euclides.

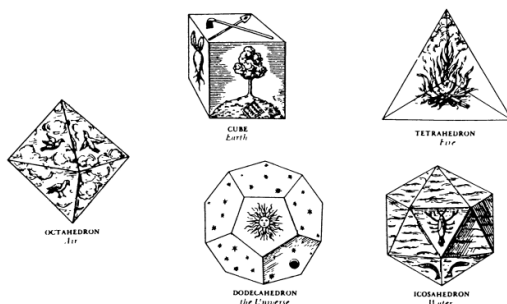


Figura 1: Platón asignó los cinco poliedros regulares a los cuatro elementos (y el cosmos) [2]

La teoría de Platón trataba de justificar los cambios de estado de los elementos, mediante re-configuraciones de los poliedros. Así mismo, relacionaba los poliedros con las propiedades de cada elemento. Por ejemplo, como el agua fluye fácilmente, tenía la forma más parecida a una esfera. De hecho, algunos aspectos de la teoría moderna de fluidos y cristales no distan mucho de estas ideas. Sin embargo, Aristóteles se posicionó en contra de esta teoría. Objetó que en el caso de que las partículas tuvieran esa forma, copias de cada una de ella deberían rellenar el espacio al menos localmente. Como de los cinco poliedros solo lo cumple el cubo (él pensaba que el tetraedro también), dedujo que la teoría era errónea. Fueron pasando los años, incluso siglos, y nadie más volvió a centrarse en estos aspectos atómicos ni en las estructuras geométricas de los átomos, hasta la aparición de Kepler en torno al 1600.

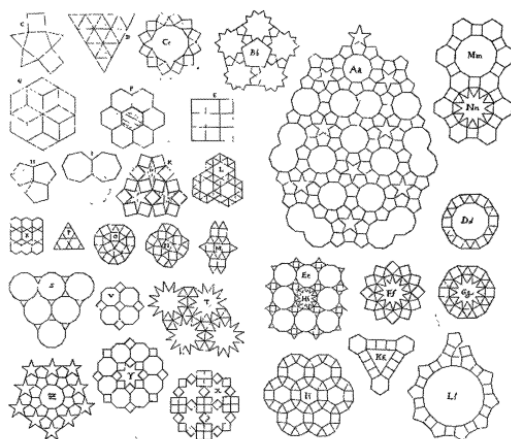


Figura 2: Teselaciones de Kepler para rellenar el plano [2]

La cristalografía no tuvo un gran peso en su obra, aunque trató de demostrar por qué los copos de nieve tenían forma hexagonal. Conjeturó que estaban compuestos por pequeñas esferas, empaquetadas de la forma más compacta posible. Observó que adquirirían una forma parecida a la de un panal de abejas, de estructura hexagonal. Además, descubrió que comprimiendo cada esfera se obtenía un dodecaedro rómbico, poliedro que rellena el espacio. Sus investigaciones no quedaron ahí. Diseñó numerosas **teselaciones** a partir de polígonos regulares y fue el primero en estudiar de forma sistemática cómo recubrir el plano. Estas observaciones eran increíblemente avanzadas para la época, pero no tuvieron impacto en la sociedad. De hecho, pasaron otros 50 años hasta que se recuperó su trabajo y se empezó a hablar de cristalografía.

### Cristalografía: primeras estructuras y modelos matemáticos

A lo largo de los siglos XVII y XVIII se dieron los primeros pasos en la teoría cristalográfica, tratando de definir qué era un cristal, sus propiedades físicas y su estructura. Todos estos trabajos no derivaron en investigaciones profundas, tan solo eran hipótesis. A mediados del s.XIX se extendió la teoría de que los cristales estaban compuestos por bloques con forma poliédrica, pegados unos a los otros. R. J. Haüy demostró que siempre se puede asignar coordenadas racionales a los vértices de los bloques que supuestamente componían un cristal [3]. Como un icosaedro regular no permite este



tipo de coordenadas, los bloques no podían tener esa simetría. Este fue el nacimiento de la teoría cristalográfica moderna. En los siguientes años, la principal rama de investigación conjeturó que los cristales eran conjuntos discretos de partículas, denominados **sistemas regulares de puntos**, generados a partir de movimientos que preservaban las distancias. Los **retículos** eran los sistemas de puntos más sencillos que reflejaban este modelo. La principal característica es que todos los puntos son traslacionalmente equivalentes, es decir, son estructuras periódicas. Por primera vez se hablaba de simetría en la teoría cristalográfica.

A partir de ese momento, el modelo cristalográfico experimentó un enorme desarrollo, especialmente gracias a Bravais y su estudio en acciones de grupos [4]. La teoría de grupos permitió mejorar el modelo cristalográfico, centrando el foco en los movimientos en vez de en los propios puntos. A finales del s.XIX se extendió el concepto de sistema regular de puntos tridimensionales a cualquier conjunto discreto que quedase invariante por la acción de un **grupo cristalográfico**. Estos se definieron como subgrupos del grupo de isometrías, formados por traslaciones, rotaciones, reflexiones y otros movimientos directos e inversos. Fedorov, Schönflies y Barlow describieron los 230 grupos cristalográficos del espacio euclídeo  $E^3$  [5]. Además, el propio Fedorov demostró que el espacio que ocupa cada partícula de un cristal es un poliedro convexo, con el punto del retículo en el centro. Estas regiones, denominadas paraleloedros, son congruentes y rellenan todo el espacio.

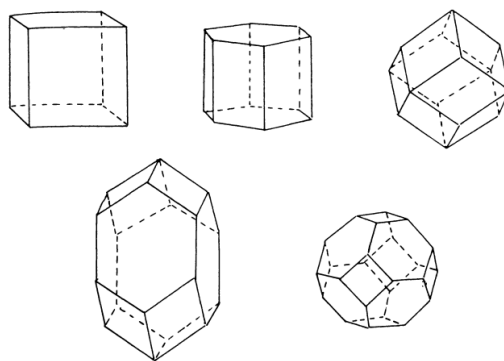


Figura 3: Los cinco paraleloedros de Fedorov que forman los cristales [2]

### Teoría cristalográfica clásica

En el siglo pasado dos acontecimientos terminaron por impulsar definitivamente la cristalografía. Uno de ellos provocó un intenso desarrollo en el modelo matemático de los cristales, obteniendo como resultado la teoría cristalográfica clásica. El otro, de carácter físico, generalizó la forma de entender los cristales, y particularmente el concepto de orden de largo alcance.

El primero de los sucesos se dio en 1900. David Hilbert, uno de los matemáticos más influyentes del s.XX, enumeró la famosísima lista de los 23 problemas no resueltos que guiarían la investigación matemática en ese siglo. El problema 18, formado por tres preguntas relacionadas con grupos de movimientos, teselaciones y empaquetamientos compactos, fue el canal de conexión entre numerosos matemáticos y los cristales, situando así la cristalografía en el panorama internacional. Una de ellas preguntaba si existía un poliedro que teselara el espacio euclídeo de 3 dimensiones, sin ser dominio

fundamental de ninguno de los 230 grupos cristalográficos, también denominados grupos espaciales. De entre todos los matemáticos que consiguieron encontrar poliedros con estas propiedades, destacó: Roger Penrose. Elaboró una serie de **teselaciones aperiódicas**, sin saber que en el futuro aparecería un nuevo tipo de material íntimamente relacionado con estas, los cuasicristales. Han tenido gran importancia en el desarrollo de la actual teoría cristalográfica y se describirán con detalle en el último capítulo de este documento.

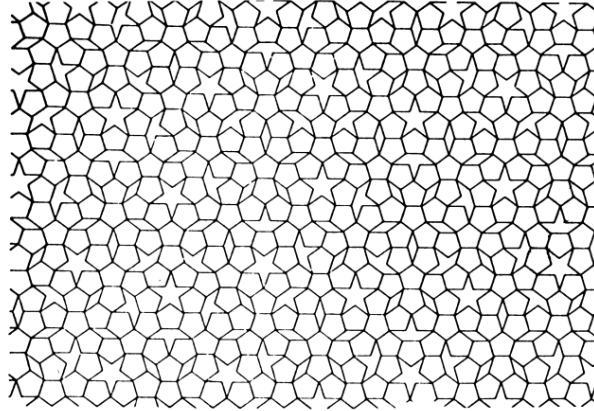


Figura 4: Primera teselación aperiódica de Penrose, desarrollada a partir de las de Kepler [6]

El segundo acontecimiento también se dio en los inicios del s.XX. Los rayos X, que habían sido descubiertos pocos años antes, fueron esenciales en los experimentos que realizó Max von Laue en 1912. Observó que los cristales tenían patrones de difracción discretos con puntos brillantes (picos de Bragg), también conocidos como **patrones de difracción discretos puros**. Aunque estos puntos parezcan las posiciones de los átomos, realmente muestran la simetría de un retículo dual al de la estructura cristalina. Justificó de forma experimental el modelo matemático de los cristales, basado en las simetrías de los retículos. Además, desde ese momento el concepto de **orden de largo alcance** se relacionó con los patrones de difracción discretos.

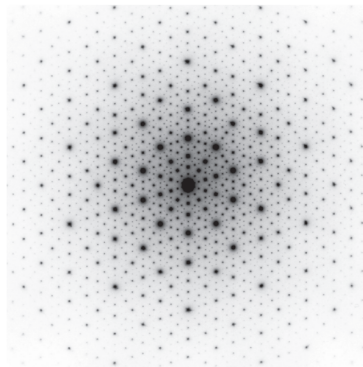


Figura 5: Patrón de difracción con simetría icosaédrica [7]

Durante 70 años los cristales se caracterizaron a través de tres conceptos que parecían sinónimos: periodicidad, orden de largo alcance y patrones de difracción discretos puros. Sin embargo, el

descubrimiento de un patrón de difracción discreto con simetría icosaédrica demostró que periodicidad y orden de largo alcance no eran esencialmente sinónimos, pues existían estructuras ordenadas que no eran periódicas. Estos cristales que producían patrones de difracción con simetrías a priori “prohibidas” se denominaron **cuasicristales**. Su aparición abrió nuevas ramas de investigación y provocó una reestructuración del modelo matemático, a partir de varias preguntas clave: ¿Qué es un cristal? ¿Qué significa orden aperiódico? ¿Cómo se pueden modelizar y construir patrones aperiódicos? ¿Cómo encajan los cuasicristales en la clasificación de los cristales?

Algunas de ellas siguen generando controversia entre los matemáticos y cristalógrafos. Aún no se ha establecido un modelo geométrico que caracterice las diferentes clases de cristales y órdenes de largo alcance. Tampoco se ha formalizado una definición de cuasicristal. Un sector de la comunidad científica defiende que estos han de tener algún eje de simetría prohibido según la restricción cristalográfica, mientras que otros prefieren no exigirlos. Sin embargo, todos coinciden en que sí generan patrones de difracción discretos puros. De hecho, existe una teoría matemática de la difracción que para cada conjunto de puntos determina si produce o no un patrón puramente discreto (mediante medidas de correlación y difracción). Todavía no se conocen condiciones geométricas para caracterizar los conjuntos de puntos que produzcan patrones de difracción discretos puros. En el *Capítulo 2* se darán pequeñas pinceladas de algunos resultados de la teoría de difracción, sin entrar en detalle, pues el documento se centra en los aspectos geométricos.

## 2. Cristales

La Unión Internacional de Cristalografía [8] fijó en 1992 la nueva definición de **cristal**: cualquier sólido que presente un patrón de difracción discreto puro. Se evitó mencionar la periodicidad, siendo el concepto de orden de largo alcance la esencia de la definición. Además, observar que los cuasicristales también se incluyen en esta definición. Al ser tan genérica, aún no se han encontrado conjuntos de puntos que modelicen la geometría de estas estructuras. No obstante, en el caso particular de los cristales perfectos, sí que existen conjuntos que los caracterizan. Serán detallados en la segunda sección de este capítulo. En la primera sección se describen varios conjuntos que preservan múltiples propiedades de los cristales y que son una buena aproximación de la definición global de cristal.

Para desarrollar este capítulo, se han seguido [2], [6], [7], [9], [10] y [11] acoplando todos los formalismos en una presentación coherente. Siempre que no se especifique lo contrario el espacio euclídeo es  $\mathbb{R}^n$ . Además, todos los conjuntos de puntos que aparecen en el artículo son numerables, por lo que se adopta un abuso del lenguaje y se mencionan directamente como conjuntos de puntos. En cuanto a las demostraciones, aparecen las relacionadas con conceptos geométricos. Los resultados basados en la teoría de difracción aportan coherencia a la explicación, pero no son demostrados.

### 2.1. Retículos, conjuntos de Delone y Meyer

Se dice que un conjunto  $A \subset \mathbb{R}^n$  es discreto si  $\forall x \in A \exists r > 0$  tal que  $B_r(x) \cap A = \{x\}$ . Notar que ese radio depende de cada punto. En cambio  $A$  es **uniformemente discreto** si  $\exists r > 0$  tal que  $B_r(x) \cap B_r(y) = \emptyset \forall x, y \in A (x \neq y)$ . En  $\mathbb{R}^n$ ,  $A$  uniformemente discreto implica que existe una mínima distancia entre sus puntos.

Por otra parte,  $A$  es **localmente finito** si para cualquier compacto  $K \subset \mathbb{R}^d$ ,  $K \cap A$  es un conjunto finito. A menudo se utilizará que  $A$  localmente finito  $\Leftrightarrow A$  discreto y cerrado; y  $A$  uniformemente discreto  $\Rightarrow A$  discreto y cerrado. Por lo tanto, se tiene que  $A$  uniformemente discreto  $\Rightarrow A$  localmente finito. El recíproco no se da, tomando como contraejemplo  $B = \{n + \frac{1}{n} \mid n \in \mathbb{N}\} \cup \mathbb{N}$ .

Siguiendo con las definiciones,  $A$  es **relativamente denso** si  $\exists R > 0$  tal que  $\overline{B_R(y)} \cap A \neq \emptyset \forall y \in \mathbb{R}^n$ . En [7] aparece otra definición equivalente, que se utilizará en algunas demostraciones:  $A$  es relativamente denso  $\Leftrightarrow$  existe  $K \subset \mathbb{R}^n$  compacto tal que  $\mathbb{R}^n = A + K$ . Para comprobarlo, si  $A$  es relativamente denso,  $\forall y \in \mathbb{R}^n \exists a \in A$  tal que  $\|y - a\| \leq R \Leftrightarrow \mathbb{R}^n = \cup_{a \in A} \overline{B_R(a)} \Leftrightarrow \mathbb{R}^n = \cup_{a \in A} (a + \overline{B_R(0)}) = A + \overline{B_R(0)}$ . En la demostración se utiliza que si  $K$  es compacto,  $\exists R > 0$  tal que  $K \subset \overline{B_R(0)}$ .

Una vez introducidos los conceptos básicos, se inicia el estudio de los conjuntos de puntos que preservan las propiedades de los cristales y se utilizan tanto en la definición de los cristales perfectos como en la obtención de los cuasicristales.

**Definición 2.1.** *Un conjunto  $A$  se denomina **conjunto de Delone (Delaunay)** si es uniformemente discreto y relativamente denso.*

Estos conjuntos se suelen denotar como  $(r, R)$ , pues vienen caracterizados por los radios de cada definición. Además, se definen los radios de **empaquetamiento**  $r_p$  y de **recubrimiento**  $R_c$  como

los radios límites que verifican las condiciones, es decir,

$$r_p = \sup\{r \in \mathbb{R} \mid B_r(x) \cap B_r(y) = \emptyset \quad \forall x, y \in A\}$$

$$R_c = \inf\{R \in \mathbb{R} \mid B_R(x) \cap A \neq \emptyset \quad \forall x \in \mathbb{R}^n\}$$

El concepto de conjunto de Delone es la abstracción matemática para las posiciones de los átomos en un material sólido. Sin embargo, como los cristales tienen características particulares, se añaden requisitos a los conjuntos de Delone. El conjunto  $A - A = \{x - y \mid x, y \in A\}$  es relevante en la modelización de la estructura atómica, pues el patrón de difracción de  $A$  viene determinado por  $A - A$ . En otras palabras, la propiedad de orden de largo alcance gira en torno a  $A - A$ . A continuación se presentan los requisitos que se imponen, ordenados de menor a mayor restricción, junto con nuevas definiciones necesarias.

Una  **$r$ -estrella** de un punto  $x \in A \subset \mathbb{R}^n$  viene dada por  $\overline{B_r(x)} \cap A$  con  $r \in \mathbb{R}^+$ . Fijado un  $r > 0$ , el conjunto de todas las  $r$ -estrellas de  $A$  salvo traslación,  $\{(\overline{B_r(x)} \cap A) - x \mid x \in A\}$ , se denomina  **$r$ -atlas**. Sea  $P_{r,x}$  la  $r$ -estrella de  $x$  salvo traslación, es decir,  $P_{r,x} = (\overline{B_r(x)} \cap A) - x = \overline{B_r(0)} \cap (A - x)$ . Observar que

$$A - A = \bigcup_{r \in \mathbb{R}^+} ((A - A) \cap \overline{B_r(0)}) = \bigcup_{r \in \mathbb{R}^+} \left( \bigcup_{x \in A} ((A - x) \cap \overline{B_r(0)}) \right) = \bigcup_{r \in \mathbb{R}^+} \bigcup_{x \in A} P_{r,x}$$

Por tanto, el conjunto  $A - A$  es la unión de los elementos de todos los  $r$ -atlas de  $A$ . A partir de estos conceptos, se dice que un conjunto  $A$  discreto tiene **complejidad local finita (FLC)** si  $\forall r \in \mathbb{R}^+$  el  $r$ -atlas es finito. Esta propiedad formaliza la noción de que existe un número finito de posibles configuraciones locales de átomos en la estructura cristalina, independientemente del número de repeticiones.

**Proposición 2.2.** *Sea  $A$  un conjunto (discreto) que tiene FLC. Entonces  $A$  es uniformemente discreto.*

*Demostración.* Supongamos que  $A$  no es uniformemente discreto. Entonces  $\forall r \in \mathbb{R}^+ \exists x \in A$  tal que  $\overline{B_r(x)} \cap A \neq \{x\}$ . Por ser  $A$  discreto,  $\forall x \in A \exists \epsilon \in \mathbb{R}^+$  tal que  $\overline{B_\epsilon(x)} \cap A = \{x\}$ . Tomemos  $x_1 \in A$  y  $\epsilon_1 \in \mathbb{R}^+$  tal que  $\overline{B_{\epsilon_1}(x_1)} \cap A = \{x_1\}$  y consideremos el  $\epsilon_1$ -atlas de  $A$ ,  $\mathcal{A}_{\epsilon_1} = \{\overline{B_{\epsilon_1}(y)} \cap A - y \mid y \in A\}$ . Uno de sus elementos es  $P_1 = (\overline{B_{\epsilon_1}(x_1)} \cap A) - x_1 = \{0\}$ . Como  $A$  no es uniformemente discreto,  $\exists x_2 \in A$  tal que  $\overline{B_{\epsilon_1}(x_2)} \cap A \neq \{x_2\}$ . El correspondiente elemento de  $\epsilon_1$ -atlas  $P_2 = (\overline{B_{\epsilon_1}(x_2)} \cap A) - x_2$  tiene al menos 2 puntos, luego  $P_2 \neq P_1$ . Por ser  $A$  discreto,  $\exists \epsilon_2 \in \mathbb{R}^+$  tal que  $\overline{B_{\epsilon_2}(x_2)} \cap A = \{x_2\}$ . Claramente  $\epsilon_2 < \epsilon_1$ , y, como  $A$  no es uniformemente discreto,  $\exists x_3 \in A$  tal que  $\overline{B_{\epsilon_2}(x_3)} \cap A \neq \{x_3\}$ . Además  $\exists \epsilon_3 \in \mathbb{R}^+$  con  $\epsilon_3 < \epsilon_2$  y  $\overline{B_{\epsilon_3}(x_3)} \cap A = \{x_3\}$ . El correspondiente elemento del  $\epsilon_1$ -atlas  $P_3 = (\overline{B_{\epsilon_1}(x_3)} \cap A) - x_3$  contiene algún punto  $z_3$  con  $0 < \|z_3\| \leq \epsilon_2$ . Por tanto,  $P_3 \neq P_2$  y  $P_3 \neq P_1$ .

En general, obtenidos  $x_1, \dots, x_n \in A$  y  $\epsilon_1 > \epsilon_2 > \dots > \epsilon_n > 0$  con  $\overline{B_{\epsilon_i}(x_i)} \cap A = \{x_i\}$  y  $\overline{B_{\epsilon_{i-1}}(x_i)} \cap A \neq \{x_i\} \forall i$ . Así pues, existe algún  $x_{n+1} \in A$  tal que  $\overline{B_{\epsilon_n}(x_{n+1})} \cap A \neq \{x_{n+1}\}$  y algún  $\epsilon_{n+1} > 0$  verificando que  $\overline{B_{\epsilon_{n+1}}(x_{n+1})} \cap A = \{x_{n+1}\}$ . El  $\epsilon_1$ -atlas de  $A$  contiene infinitos elementos, pues los  $P_n = (\overline{B_{\epsilon_1}(x_n)} \cap A) - x_n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , son distintos dos a dos. En efecto, si  $n < m$   $P_n$  solo tiene el punto 0 a distancia menor o igual que  $\epsilon_n$  del origen, pero  $P_m$  tiene un punto  $z$  con  $0 < \|z\| \leq \epsilon_{m-1} \leq \epsilon_n$ , luego  $P_n \neq P_m$ .  $\square$

**Proposición 2.3.** *Un conjunto  $A \subset \mathbb{R}^n$  (discreto) presenta FLC  $\Leftrightarrow A - A$  es localmente finito.*

*Demostración.* Sea  $r > 0$ . Si  $A$  tiene FLC, el  $r$ -atlas es finito. Por lo tanto,  $(A - A) \cap \overline{B_r(0)}$  contiene un número finito de  $r$ -estrellas. Por la proposición anterior,  $A$  es uniformemente discreto y por tanto también es localmente finito. Esto significa que cada  $r$ -estrella es finita. Como  $r$  es arbitrario y cada  $K \subset \mathbb{R}^n$  compacto está contenido en  $B_r(0)$  para algún  $r$ , se tiene que  $A - A$  es localmente finito.

Por otro lado, si  $A - A$  es localmente finito,  $A$  también lo es. Se ve de forma directa con el recíproco. En consecuencia  $A$  es discreto. Además,  $(A - A) \cap \overline{B_r(0)}$  es finito para cualquier  $0 < r < \infty$ . Entonces  $A - A$  se puede representar como  $A - A = \{z_i \mid i \in \mathbb{N} \cup \{0\}\}$  con  $z_0 = 0$  y  $|z_i| \leq |z_{i+1}| \forall i \geq 0$ . Sea una  $r$ -estrella  $P = A \cap \overline{B_r(x)}$  con  $x \in A$ , se tiene que  $\forall y \in P$   $y - x \in (A - A) \cap \overline{B_r(0)}$ , es decir,  $y = x + z_i$  con  $z_i \in \overline{B_r(0)}$ . Así pues, cualquier  $r$ -estrella de  $A$  es de la forma  $\{x + z_i \mid i \in I\}$  con  $x \in A$  e  $I \subset \{i \mid |z_i| \leq r\}$ , que es no vacío. Como solo hay finitas opciones para  $I$  y  $r$  es arbitrario, se tiene que  $A$  es FLC.  $\square$

**Definición 2.4.** Un conjunto de Delone  $A$  se denomina **conjunto de Delone de tipo finito** si  $A - A$  es localmente finito.

La *Proposición 2.3* demuestra que un conjunto de Delone con FLC es equivalente a un conjunto de Delone de tipo finito. De hecho, en [9] se restringe la condición de FLC a que tan solo el  $2R$ -atlas sea finito, siendo  $R$  la constante de  $A$  relativamente denso. Estos conjuntos tienen finitas configuraciones locales, como sucede con los cristales en la realidad. Por lo tanto, los conjuntos de Delone de tipo finito se ajustan mejor al concepto de cristal que los conjuntos de Delone. Por otra parte, al ser conjuntos relativamente densos, algunas de las finitas configuraciones locales han de repetirse indefinidamente.

En este contexto, se dice que  $A$  es **repetitivo** si  $\forall r \in \mathbb{R}^+ \exists M \in \mathbb{R}^+$  tal que toda  $\overline{B_M(x)}$  contiene una copia de cada elemento del  $r$ -atlas de  $A$ . Esto significa que para cada  $r > 0$  se tiene que las  $r$ -estrellas son relativamente densas en  $A$ . Ahora bien, si  $A$  es localmente finito y repetitivo, todos los  $r$ -atlas son finitos, es decir,  $A$  tiene FLC. Por lo tanto, un conjunto de Delone repetitivo también es un conjunto de Delone de tipo finito. A pesar de esta restricción a  $A - A$ , se puede especificar aún más, para obtener conjuntos que aproximen mejor a la definición genérica de cristal.

**Definición 2.5.** Un conjunto  $A$  es un **conjunto cuasirregular** si  $A$  y  $A - A$  son conjuntos de Delone.

**Definición 2.6.** Un conjunto  $A$  es un **conjunto de Meyer** si  $A$  es un conjunto de Delone tal que  $A - A \subseteq A + F$  siendo  $F$  un conjunto finito. [12]

Ambos conceptos son equivalentes, es decir,  $A$  conjunto cuasirregular  $\Leftrightarrow A$  conjunto de Meyer. La demostración se encuentra en [10]. En este trabajo se utilizarán las dos definiciones bajo el nombre de conjunto de Meyer. Si  $A - A$  es un conjunto de Delone,  $A - A$  es localmente finito y por lo tanto se tiene que cualquier conjunto de Meyer es a su vez un conjunto de Delone de tipo finito. Por otra parte, un conjunto de Meyer no tiene por qué ser repetitivo. Por ejemplo,  $C = \mathbb{Z} \cup \{\frac{1}{2}\}$  es un conjunto de Meyer por ser  $C$  y  $C - C$  conjuntos de Delone, pero no es repetitivo tomando  $r > \frac{1}{2}$ .

Los conjuntos de Meyer son esenciales en el modelo cristalográfico y en la descripción de los cuasicristales. Preservan todas las propiedades de los conjuntos de Delone de tipo finito y su estructura refleja cierto orden de largo alcance. Como ya se ha mencionado anteriormente, este concepto es sinónimo de los patrones de difracción puros. Matemáticamente, los patrones de difracción vienen caracterizados por **una medida de difracción**, que se obtiene a partir de la transformada de Fourier de la medida de autocorrelación. Gracias al teorema de descomposición de Lebesgue (capítulo

8 de [7]), se puede separar en tres componentes, una discreta y dos continuas. En general, se dice que un patrón de difracción posee un **espectro discreto** y otro **continuo**. Los picos de Bragg son el conjunto de puntos en el que se concentra el espectro discreto.

En cuanto a los conjuntos de Meyer, su espectro discreto es un conjunto relativamente denso. La demostración se encuentra en [11]. El problema es que el espectro continuo puede ser nulo, en cuyo caso sí sería un patrón de difracción puro, u otro conjunto relativamente denso. De nuevo las condiciones para que esto suceda se encuentran en [11]. Por lo tanto, no todos los conjuntos de Meyer originan patrones de difracción puros. De hecho, tampoco se da que todos los conjuntos con patrones de difracción puros son de Meyer. En el *Capítulo 10* de [7] se muestra un contraejemplo. Ni siquiera se cumple que todo conjunto de Delone repetitivo con patrón discreto puro es de Meyer. Un contraejemplo sería el “scrambled Fibonacci tiling”, detallado en [13].

No obstante, como su patrón de difracción presenta picos de Bragg, la mayoría de libros y artículos consultados coinciden en que los conjuntos de Meyer son una buena aproximación a la definición genérica de cristal. Además, a pesar de que el espectro discreto pueda ser relativamente denso, el conjunto de los picos de Bragg con intensidad mayor que un cierto  $\epsilon$  es relativamente denso. Esto significa que en el patrón se verían puntos brillantes, y haciendo zoom progresivamente aparecerían cada vez más puntos. Como la precisión de los experimentos está limitada, en la práctica no se pueden distinguir estos patrones de los puramente discretos.

Lagarias definió los **conjuntos de Patterson** como aquellos conjuntos de Delone que tenían una única medida de difracción puramente discreta. Estos se ajustan a la definición de cristal, pero no tienen una caracterización geométrica. En [14] se demuestra que los cristales perfectos son conjuntos de Patterson cuyo espectro está concentrado en los puntos del retículo dual  $\mathcal{L}^*$  (el lector entenderá a continuación este concepto). Tras este paréntesis, se presenta otro conjunto de puntos indispensable tanto en la definición formal de un cristal perfecto como en la obtención de los cuasicristales.

**Definición 2.7.** *Un conjunto  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  es un **retículo** si  $\mathcal{L} = \{\sum_{i=1}^n m_i b_i \mid \forall m_i \in \mathbb{Z}\}$ , con  $b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}^n$  linealmente independientes sobre  $\mathbb{R}$ .*

Una base del retículo es  $\{b_1, \dots, b_n\}$ . Observar que  $\mathcal{L}$  es un conjunto discreto. Visualizando  $\mathcal{L}$  y  $\mathbb{R}^n$  como grupos abelianos (con la suma como operación interna), el grupo cociente  $\mathbb{R}^n/\mathcal{L}$  es un grupo abeliano compacto, homeomorfo a un toro  $n$ -dimensional. De hecho, los retículos se pueden caracterizar como los subgrupos discretos y co-compactos de  $\mathbb{R}^n$ . En la *Figura 6* se pueden ver dos ejemplos.

Los retículos duales,  $\mathcal{L}^*$  son esenciales para entender los patrones de difracción. Se definen como  $\mathcal{L}^* = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \langle x, y \rangle \in \mathbb{Z}, \forall x \in \mathcal{L}\}$ . Se comprueba de forma directa que la base de  $\mathcal{L}^*$ ,  $\{b_1^*, \dots, b_n^*\}$ , viene unívocamente determinada por las  $n^2$  ecuaciones  $\langle b_i^*, b_j \rangle = \delta_{ij}$ . Tienen gran importancia en la teoría matemática de difracción, pues los picos de Bragg de los cristales perfectos se encuentran en los puntos de  $\mathcal{L}^*$ . No se entrarán en mayores detalles de este campo. En caso de que suscite curiosidad en el lector, se recomiendan [7] y [14].

**Proposición 2.8.** *Un retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  es un conjunto de Meyer. Consecuentemente, es un conjunto de Delone de tipo finito.*

*Demostración.* Por definición,  $\mathcal{L} - \mathcal{L} = \mathcal{L}$ . Basta demostrar que  $\mathcal{L}$  es de Delone. Para ello, sea  $K = \{\sum_{i=1}^n \alpha_i b_i \mid 0 \leq \alpha_i \leq 1\}$ , que es un compacto tal que  $\mathcal{R}^n = \cup_{x \in \mathcal{L}} (x + K)$ , es decir,  $\mathcal{L}$  es

relativamente denso. Por otra parte, tomar  $r > 0$  tal que  $\exists y \in \mathbb{R}^n$  con  $B_r(y) \subset K$ . Entonces se tiene que  $B_r(x) \cap A = \{x\}$  para cada  $x \in \mathcal{L}$ .  $\square$

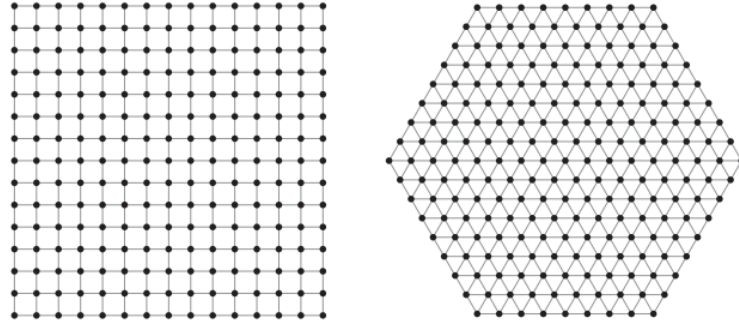


Figura 6: Dos subconjuntos finitos de diferentes retículos  
[7]

**Proposición 2.9.** *Un retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  es un conjunto repetitivo.*

*Demostración.* Sea  $x \in \mathcal{L}$  y  $r > 0$ . La  $r$ -estrella de  $x$  viene dada por  $\{y \in \mathcal{L} \mid \|y - x\| \leq r\}$ . Tomando  $y$  tal que  $\|y - x\| \leq r$ , se tiene que  $y - x = a \in \mathcal{L}$  pertenece a la  $r$ -estrella del origen. Además, sea  $a$  perteneciente a la  $r$ -estrella del origen, es decir,  $\|a\| \leq r$ , se tiene que  $\exists y = a + x \in \mathcal{L}$  tal que  $\|y - x\| = \|a\| \leq r$ . Por lo tanto, los  $r$ -atlas están formados por un único elemento, la  $r$ -estrella del origen, y se puede escoger  $M > 0$  tal que para cualquier  $z \in \mathbb{R}^n$ , la bola  $\overline{B}_M(z)$  contenga la  $r$ -estrella centrada en algún punto de  $A$ .  $\square$

A partir de los retículos se obtienen dos conjuntos de gran importancia en el presente documento: los **empaquetamientos cristalográficos**, que caracterizan las estructuras de los cristales perfectos; y los **conjuntos modelo**, que sirven para representar la mayoría de los cuasicristales conocidos. Ambos se detallarán más adelante.

## 2.2. Definición de cristal perfecto

Un cristal perfecto es un cristal que presenta un tipo particular de **periodicidad**. Los conjuntos de puntos mostrados hasta el momento no especifican nada sobre esta propiedad. Se necesitan nuevos requisitos para caracterizar las estructuras periódicas de los cristales perfectos.

**Definición 2.10.** *Un conjunto  $A \subset \mathbb{R}^n$  es un **empaquetamiento cristalográfico** si existe un retículo  $\mathcal{L}$  y un conjunto finito  $F$  tal que  $A = \mathcal{L} + F$ .*

**Proposición 2.11.** *Un empaquetamiento cristalográfico  $A \subset \mathbb{R}^n$  es un conjunto de Meyer.*

*Demostración.* Como  $\mathcal{L}$  es localmente finito, dado un compacto  $K \subset \mathbb{R}^n$ , hay a lo sumo la unión de  $|F|$  conjuntos finitos en  $K \cap A$ . Así pues,  $A$  es localmente finito. De la periodicidad de  $\mathcal{L}$  se extrae que  $A$  es uniformemente discreto. De igual forma, como  $\mathcal{L}$  es relativamente denso,  $A$  también lo es. Por lo tanto,  $A$  es Delone.  $A - A = (\mathcal{L} + F) - (\mathcal{L} + F) = \mathcal{L} + F - F = A + F'$  con  $F' = -F$  que es de nuevo un conjunto finito. Esto prueba que  $A$  es de Meyer por la definición equivalente mencionada anteriormente.  $\square$



Por otra parte, un **periodo** de  $A$  se define como  $t \in \mathbb{R}^n$  tal que  $t + A = A$ . El conjunto de todos los periodos de  $A$  se denota como  $\text{per}(A)$ . La dimensión del subespacio vectorial que genera se denomina rango. Además,  $\text{per}(A)$  es un subgrupo de  $\mathbb{R}^n$  y su estructura (como grupo) determina el tipo de periodicidad de  $A$ .

Un conjunto de puntos discreto  $A \subset \mathbb{R}^n$  es **periódico**, de rango  $0 < m \leq n$ , si  $\text{per}(A)$  es no trivial, con rango  $m$ . Cuando  $\text{per}(A) = \{0\}$ ,  $A$  se dice que es **no periódico**. Si  $A$  es periódico y en particular  $\text{per}(A) = \mathcal{L}$ , siendo  $\mathcal{L}$  un retículo,  $A$  recibe el nombre de conjunto **cristalográfico**. En caso contrario  $A$  es un conjunto **no cristalográfico**. Observar que No periódico  $\Rightarrow$  No cristalográfico, pero la inversa no se da en general. Esto significa que un conjunto no cristalográfico puede contener periodos no triviales. En algunas fuentes se utiliza *completamente periódico* en vez de cristalográfico.

**La estructura atómica de un cristal perfecto se define como un conjunto cristalográfico.** Observar que no se mencionan los empaquetamientos cristalográficos, aunque sí aparecen los retículos en la definición. Sin embargo, la siguiente proposición demuestra que los cristales perfectos se pueden caracterizar mediante los empaquetamientos cristalográficos. En la demostración se utilizan conceptos que se presentan a continuación.

La co-compacidad del retículo  $\mathcal{L}$  permite escoger un conjunto de representantes de  $\mathbb{R}^n/\mathcal{L}$  relativamente compacto y medible. Se denomina **dominio fundamental** y si una base de  $\mathcal{L}$  es  $\{b_1, \dots, b_n\}$  la elección natural es  $FD_{\mathcal{L}} = \{\sum_{i=1}^n \alpha_i b_i \mid 0 \leq \alpha_i < 1 \forall i\}$ . Su volumen se define como  $\text{vol}(FD_{\mathcal{L}}) = |\det(b_1, \dots, b_n)|$ . Como existen infinitas bases posibles de  $\mathcal{L}$ , esta elección no es única. Todas tienen el mismo volumen, pues la matriz de cambio de base tiene elementos enteros y su determinante es  $\pm 1$ . Esto significa que  $\text{vol}(FD_{\mathcal{L}})$  es un invariante de  $\mathcal{L}$ . Por otro lado,  $A \oplus B$  denota la suma directa de Minkowski. Es una suma de conjuntos como la definida previamente, solo que cada elemento de  $A + B$  tiene una única representación.

**Proposición 2.12.** *Un conjunto localmente finito  $A \subset \mathbb{R}^n$  es cristalográfico  $\Leftrightarrow$  existen un retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  y un conjunto finito  $F \subset \mathbb{R}^n$  tales que  $A = \mathcal{L} + F$ , es decir,  $A$  es un empaquetamiento cristalográfico. De hecho, se puede escoger  $F$  tal que  $A = \mathcal{L} \oplus F$ .*

*Demostración.* Sea  $A$  un conjunto cristalográfico y sea  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  el retículo tal que  $\text{per}(A) = \mathcal{L}$ . Tomando  $\mathcal{C}$  como el dominio fundamental definido anteriormente, se tiene que  $\mathbb{R}^n = \bigcup_{t \in \mathcal{L}} (t + \mathcal{C})$ , que es una unión disjunta. Se define  $F = \mathcal{C} \cap A$ , que es finito por ser  $A$  localmente finito. Ahora bien, dado  $x \in A$ , por la construcción anterior  $\exists! t \in \mathcal{L}$  tal que  $x \in t + \mathcal{C}$ , es decir,  $x - t \in \mathcal{C}$ . Además, como  $-t \in \text{per}(A)$ ,  $x - t \in A$ . Por lo tanto,  $x - t \in F$  y se tiene que  $A = \mathcal{L} \oplus F$ .

Para la otra implicación, ya se ha demostrado en la *Proposición 2.11* que  $A$  es de Meyer y por lo tanto localmente finito. Además, si  $t \in \text{per}(A)$  se tiene que  $t + A = A \Rightarrow t \in A - A = \mathcal{L} + (F - F)$ , es decir,  $\text{per}(A) \subset \mathcal{L} + (F - F)$  con  $F - F$  finito. Así pues,  $\text{per}(A)/\mathcal{L}$  es finito. Por el tercer teorema de isomorfía, se tiene que  $\mathbb{R}^n/\text{per}(A) \simeq \frac{(\mathbb{R}^n/\mathcal{L})}{(\text{per}(A)/\mathcal{L})}$  y como el cociente de compactos también es compacto, se da que  $\mathbb{R}^n/\text{per}(A)$  es compacto. Aunque no se haya demostrado en el documento, los retículos se caracterizan mediante subgrupos discretos co-compactos de  $\mathbb{R}^n$ , por lo que  $\text{per}(A)$  es un retículo y  $A$  es cristalográfico.  $\square$

Esta proposición permite asociar los empaquetamientos cristalográficos con la periodicidad propia de los cristales perfectos. Por lo tanto, estos son los conjuntos elegidos para caracterizarlos. A partir de este capítulo, nos centraremos en cuestiones propias de los cuasicristales, así como el

teorema de la restricción cristalográfica. Si el lector desea conocer en profundidad el campo de los cristales perfectos, se aconseja por ejemplo [15] y las referencias ahí contenidas.

### 2.3. Teorema de la restricción cristalográfica

Como ya se ha mencionado anteriormente, en 1982 se descubrió un patrón de difracción con una simetría 10-rotacional. Hasta ese momento, este tipo de simetrías se creían prohibidas en estructuras cristalinas. El motivo es el **teorema de la restricción cristalográfica (TRC)**. Este teorema declara que en dimensiones 2 y 3, tanto retículos como empaquetamientos cristalográficos solo pueden tener simetrías 2,3,4 y 6-rotacionales. La sección se divide en dos subsecciones: la primera aclara los conceptos de simetrías, rotaciones y simetrías k-rotacionales; y la segunda detalla el teorema junto con las demostraciones necesarias.

#### Isometrías

Una isometría  $\phi$  de  $\mathbb{R}^n$  es una transformación que preserva las distancias entre dos puntos cualesquiera, es decir,  $\|\phi(x - y)\| = \|x - y\| \forall x, y \in \mathbb{R}^n$ . Se denomina orden de  $\phi$  al menor  $k$  tal que  $\phi^k = \mathbb{I}$ . Las isometrías se caracterizan a partir de los subespacios que permanecen fijos o invariantes. Si  $\phi(0) = 0$  se dice que la isometría es lineal. En general, toda isometría es una aplicación afín, pues se puede expresar como una composición de una isometría lineal con una traslación. Estas se representan a partir de matrices unimodulares, es decir, con determinante  $\pm 1$ . De hecho, escogiendo una base ortonormal de  $\mathbb{R}^n$ , su matriz  $M$  viene dada por

$$M = \begin{pmatrix} A_1 & & & & \\ & A_2 & & & \\ & & A_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & A_m \end{pmatrix}$$

donde cada  $A_j$  puede ser 1,-1 o una matriz  $2 \times 2$  de la forma  $\begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$ . El grupo de todas las isometrías lineales de  $\mathbb{R}^n$  se denomina **grupo ortogonal** y se denota por  $O(n)$ . El determinante de la matriz de una isometría lineal es  $\pm 1$ . De hecho,  $\phi$  es una **rotación**  $\Leftrightarrow \det(M) = 1$ . El ángulo de rotación  $\theta$  indica el orden de la rotación (cuando es finito), es decir, si  $\theta = \frac{2\pi}{k}$  el orden es  $k$ . El grupo de las rotaciones de  $\mathbb{R}^n$  se denota como  $SO(n)$  y se denomina **grupo especial ortogonal**.

Por último, se define el **grupo de simetrías** de un objeto como el grupo maximal de isometrías que lo deja invariante. Por lo tanto, si una estructura presenta simetría  $k$ -rotacional significa que una rotación de orden  $k$  la transforma en ella misma.

#### Teorema de la restricción cristalográfica

Antes de entrar en demostraciones formales, se convence al lector de que en efecto los retículos en  $\mathbb{R}^2$  no pueden tener simetría 5-rotacional.

Supongamos lo contrario, es decir,  $\mathcal{L}$  tiene simetría 5-rotacional. Como es uniformemente discreto, existe una mínima distancia entre dos puntos cualesquiera. Además, todos los puntos son centros de rotación. Tomando como centros de rotación dos puntos cuya distancia entre ellos es mínima, rotar el conjunto vía la simetría 5-rotacional, aunque en sentidos opuestos, como indica la *Figura 7*. Todos los puntos obtenidos forman parte de  $\mathcal{L}$ , aunque dos de ellos se encuentran a una distancia inferior a la mínima, llegando a una contradicción.

Usando el mismo argumento para 2, 3, 4 y 6 no aparece ningún problema. De hecho, para el caso de la simetría 6-rotacional, los dos puntos que se usan en el argumento anterior coinciden en uno solo, y este forma un triángulo equilátero con los dos centros de rotación. De forma análoga al caso con  $k = 5$ , se puede observar que tampoco es posible para simetrías  $k$ -rotacionales con  $k > 6$ .

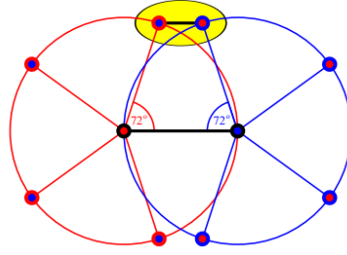


Figura 7: Argumento geométrico del teorema de la restricción cristalográfica [6]

Una vez detallado el argumento geométrico, se presenta el teorema de la restricción cristalográfica para retículos y empaquetamientos cristalográficos, así como las demostraciones y los lemas que se utilicen en ellas.

**Lema 2.13.** *Sea un retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$ . Si  $\mathcal{R} \in O(n)$  verifica que  $\mathcal{R}\mathcal{L} \subset \mathcal{L}$ , se tiene que  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$ . Además, el polinomio característico de  $\mathcal{R}$  verifica  $P_{\mathcal{R}}(\lambda) = \det(\mathcal{R} - \lambda\mathbb{I}) \in \mathbb{Z}[\lambda]$*

*Demostración.* Se define  $S_r = S \cap \overline{B_r(0)}$  para cualquier  $S \subset \mathbb{R}^n$ . Dada  $\mathcal{R} \in O(n)$ , se tiene que  $\mathcal{R}\mathcal{L} \subset \mathcal{L} \Rightarrow (\mathcal{R}\mathcal{L})_r \subset \mathcal{L}_r \forall r \geq 0$ . Para cada  $r$ , ambos conjuntos tienen la misma cardinalidad, por lo que  $(\mathcal{R}\mathcal{L})_r = \mathcal{L}_r \forall r \geq 0$ , es decir,  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$ .

Por otra parte, sea  $\{b_1, \dots, b_n\}$  una base de  $\mathcal{L}$ . Como  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$ , se tiene que  $\mathcal{R}b_i = \sum_{j=1}^n b_j a_{ji}$  con todos los  $a_{ji} \in \mathbb{Z}$ . Por lo tanto,  $\mathcal{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^n$  es la matriz de  $\mathcal{R}$  en la base  $B$ . El polinomio característico no depende de la elección de la base, por lo que  $P_{\mathcal{R}}(\lambda) = \det(\mathcal{A} - \lambda\mathbb{I})$  cuyos coeficientes son todos enteros.  $\square$

De este lema se extrae que la aparición de un grupo de simetría en un retículo realmente depende de si existe una representación entera de dicho grupo.

**Teorema 2.14.** *Un retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  con  $n \in \{2, 3\}$  puede tener simetría  $k$ -rotacional para  $k \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$*

*Demostración.* Sea  $n = 2$ , una rotación  $\mathcal{R}$  de ángulo  $\theta$  viene dada por la matriz en cualquier base ortonormal:

$$\mathcal{R}_\theta = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

con polinomio característico  $P_{\mathcal{R}}(\lambda) = \det(\mathcal{R}_\theta - \lambda\mathbb{I}) = \lambda^2 - \text{tr}(\mathcal{R}_\theta)\lambda + \det(\mathcal{R}_\theta) = \lambda^2 - 2\cos(\theta)\lambda + 1$ , donde  $\text{tr}(A)$  es la traza de la matriz  $A$ . Por lo tanto, por el lema anterior se tiene que  $2\cos(\theta) \in \mathbb{Z}$ , es decir,  $|\cos(\theta)| \in \{0, \frac{1}{2}, 1\}$ . El caso  $n = 3$  es análogo una vez obtenido el polinomio característico de  $\mathcal{R}_\theta$ . Para ello, como  $\det(\mathcal{R}_\theta) = 1$  y los autovalores son reales o complejos y vienen en pares (uno y su conjugado), 1 siempre es autovalor de  $\mathcal{R}_\theta$ . Así pues, el polinomio característico viene dado por  $(1 - \lambda)P_{\mathcal{R}}(\lambda)$ , siendo  $P_{\mathcal{R}}(\lambda)$  el de dimensión 2.  $\square$

Queda demostrado el teorema de la restricción cristalográfica con retículos. En el caso de los empaquetamientos cristalográficos, es necesario introducir nueva notación para movimientos euclídeos. Sea  $\mathcal{R} \in O(n)$  y  $a \in \mathbb{R}^n$ , se denota  $(a, \mathcal{R})$  a la función afín  $\psi$  definida así:

$$\begin{aligned} \psi : \mathbb{R}^n &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ x &\mapsto \mathcal{R}x + a \end{aligned}$$

Se verifica que  $(a, \mathcal{R})(b, \mathcal{S}) = (a + \mathcal{R}b, \mathcal{R}\mathcal{S})$ . Por lo tanto, forman un grupo con esta operación. De hecho, es el producto semidirecto  $\mathbb{R}^n \rtimes O(n)$ . El elemento neutro es  $(0, \mathbb{I})$  y  $(-\mathcal{R}^{-1}a, \mathcal{R}^{-1})$  es el inverso de  $(a, \mathcal{R})$ .

**Lema 2.15.** *Sea  $A$  un conjunto localmente finito y cristalográfico con  $\text{per}(A) = \mathcal{L}$ , siendo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  un retículo. Si  $(a, \mathcal{R})$  es un movimiento euclídeo tal que  $(a, \mathcal{R})A = A$  se verifica que  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$  y  $P_{\mathcal{R}}(\lambda) = \det(\mathcal{R} - \lambda\mathbb{I}) \in \mathbb{Z}[\lambda]$ .*

*Demostración.* Por la Proposición 2.12 se tiene que  $A = \mathcal{L} \oplus F$  con  $F$  finito. Así pues  $A = \bigcup_{v \in F} (v + \mathcal{L})$ , siendo la unión disjunta. Por hipótesis

$$A = (a, \mathcal{R})A = \bigcup_{v \in F} (\mathcal{R}v + \mathcal{R}\mathcal{L}) + a \Rightarrow A' = A - a = \bigcup_{v \in F} (\mathcal{R}v + \mathcal{R}\mathcal{L})$$

donde  $\mathcal{R}\mathcal{L}$  es otro retículo. Como  $\text{per}(A') = \text{per}(A)$  se tiene que  $\mathcal{R}\mathcal{L} \subset \text{per}(A') = \text{per}(A) = \mathcal{L}$ . Aplicando el Lema 2.13 se concluye que  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$  y  $P_{\mathcal{R}}(\lambda) = \det(\mathcal{R} - \lambda\mathbb{I}) \in \mathbb{Z}[\lambda]$ .  $\square$

**Teorema 2.16.** *Sea un movimiento euclídeo  $(a, \mathcal{R})$  con  $n \in \{2, 3\}$  tal que deja invariante un conjunto localmente finito y cristalográfico  $A$ . Entonces  $\mathcal{R}$  genera un grupo cíclico  $\mathcal{C}_k$  con  $k \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$ .*

El grupo cíclico de orden  $k$ ,  $\mathcal{C}_k$ , está generado por un elemento  $a$  de orden  $k$ . Se suele representar como  $\mathcal{C}_k = \langle a \mid a^k = e \rangle$ , donde  $e$  es el elemento neutro. El resto de elementos de  $\mathcal{C}_k$  son  $\{a^l \mid l \in \{2, \dots, k\}\}$ . Por otra parte, si  $\mathcal{R}$  es una simetría  $k$ -rotacional con ángulo  $\theta = \frac{2\pi}{k}$ , también lo es para  $\theta \in \{\frac{4\pi}{k}, \frac{6\pi}{k}, \dots, \frac{2(k-1)\pi}{k}\}$ , es decir, genera  $\mathcal{C}_k$ .

*Demostración.* De nuevo por la Proposición 2.4  $A = \mathcal{L} \oplus F$ , con  $\text{per}(A) = \mathcal{L}$ . Por el Lema 2.7  $\mathcal{R}\mathcal{L} = \mathcal{L}$ . Si  $\mathcal{R} \in SO(n)$ , por el Teorema 2.6 queda demostrado. En caso contrario, es decir,  $\mathcal{R} \in O(n) \setminus SO(n)$ , diferenciamos según la dimensión. Para  $n = 2$ ,  $\mathcal{R}$  es una reflexión respecto de una recta, es decir, tiene orden 2 y genera  $\mathcal{C}_2$ . Para  $n = 3$ ,  $\mathcal{R}$  se puede representar como el producto de  $\mathcal{R}' \in SO(3)$  con  $-\mathbb{I}$ . El orden de  $\mathcal{R}$  es el mínimo común múltiplo de los dos órdenes. Ahora bien, como  $-\mathbb{I}$  tiene orden 2 y por el Teorema 2.6 el orden de  $\mathcal{R}'$  es  $k' \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$ , no se añade ningún orden más.  $\square$

Ambos teoremas demostrados limitan las simetrías  $k$ -rotacionales de los cristales. Sin embargo, el descubrimiento de 1982 revelaba una simetría icosaédrica en la estructura cristalina. Esta contiene simetrías 5-rotacionales (*Figura 8*), prohibidas según la restricción cristalográfica [1]. Aunque no se demuestre, tener en cuenta que si un cristal presenta simetría  $k$ -rotacional, en el patrón de difracción aparece una simetría  $2k$ -rotacional. Es por eso que en la *Figura 5* se observa una simetría 10-rotacional.

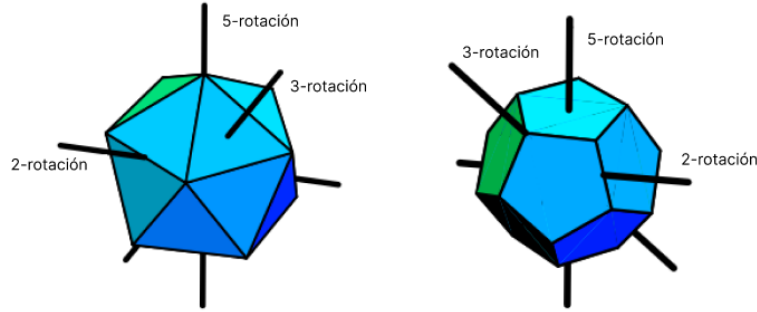


Figura 8: Simetría icosaédrica, presente en el icosaedro (izquierda) y el dodecaedro (derecha) [6]

A pesar de la simetría incompatible con los cristales convencionales, el material descubierto generaba un patrón de difracción discreto. Por lo tanto, su estructura presentaba orden de largo alcance. Aunque no fuese un cristal, se parecía mucho a uno de ellos. De ahí que surgiera la nueva categoría: **cuasicristales**.

Antes de continuar con los conceptos particulares de los cuasicristales, se presenta al lector unos resultados sobre la mínima dimensión tal que un retículo posee simetrías  $k$ -rotacionales, sin restricciones. Serán de gran utilidad en un métodos de obtención de los cuasicristales. Las demostraciones se pueden encontrar en [7].

La función de Euler  $\varphi$  se define como  $\varphi(n) = \{k \in \mathbb{N} \mid k \leq n, \text{mcd}(k, n) = 1\}$ , es decir, son los enteros positivos menores o iguales que  $n$  y coprimos con  $n$ . La igualdad es para incluir  $n = 1$ . Algunas de las propiedades, denotando un primo cualquiera  $p$ , son:

$$\varphi(n) = \begin{cases} p-1 & \text{si } n = p \\ (p-1)p^{k-1} & \text{si } n = p^k \\ \varphi(a)\varphi(b) & \text{si } n = ab, \text{ con } \text{mcd}(a,b) = 1 \end{cases}$$

**Lema 2.17.** Sea  $\mathcal{L}$  un retículo con un grupo de simetría que contiene un elemento de orden  $p^r$  siendo  $p$  primo. La mínima dimensión de  $\mathcal{L}$  es  $d_n = \varphi(p^r)$

Este lema solo indica la mínima dimensión de los retículos cuando la simetría es de orden  $p^r$ . Para el caso genérico, se introduce una variante de la función de Euler

$$\varphi_a(n) = \begin{cases} 0 & \text{si } n = 1 \\ \varphi(n) & \text{si } n = p^r \\ \varphi_a(k) & \text{si } n = 2k \text{ con } k \text{ impar} \\ \varphi_a(a) + \varphi_a(b) & \text{si } n = ab \text{ con } \text{mcd}(a,b) = 1, a \neq 2, b \neq 2 \end{cases}$$

**Teorema 2.18.** *Sea  $\mathcal{L}$  un retículo con un grupo de simetría que contiene un elemento de orden  $n$ . La mínima dimensión de  $\mathcal{L}$  es  $d_n = \varphi_a(n)$*

No obstante, para la construcción de los cuasicristales planos, se requiere que un subespacio 2-dimensional de  $\mathbb{R}^n$  permanezca invariante aplicando la simetría. Es por eso que en realidad  $\varphi_a(n)$  es una cota inferior.

### 3. Cuasicristales

Desde un punto de vista físico, los cuasicristales son materiales que generan **patrones de difracciones discretos con puntos brillantes**. Se incluyen dentro de la definición de **cristal** dada en 1992. No son cristales perfectos, siguiendo la definición mostrada en el capítulo anterior, pues no presentan periodicidad en tres direcciones independientes. Sin embargo, aún no se ha formalizado una definición de cuasicristal. Algunos autores exigen que su estructura presente simetrías prohibidas por el TRC, mientras que otros generalizan la definición a todo cristal no periódico o no cristalográfico [16]. Observar que si se toma la primera definición, no existen cuasicristales unidimensionales, mientras que en la segunda sí. Además, la segunda definición permite establecer diferentes categorías de cuasicristales.

Por lo tanto, existen múltiples aproximaciones a la definición matemática de un cuasicristal, basadas en diferentes ramas y herramientas: mediante las funciones cuasiperiódicas de Bohr, desarrolladas a través del análisis de Fourier (*Capítulo 8 de* [7]); modelizando los patrones de difracción gracias a la delta de Dirac (ya se ha mencionado brevemente en el capítulo anterior, siguiendo [9] y [11]); y analizando la geometría de las estructuras atómicas con los conjuntos de Meyer ([7], [9] y [10]). Pese al gran esfuerzo realizado, no se ha conseguido una caracterización geométrica completa de los cuasicristales.

La última aproximación mencionada establece una conexión directa con el método de obtención que se va a describir: la **proyección**. Por lo tanto, se escoge esta opción. Se mostrarán las propiedades que los cuasicristales comparten con los cristales perfectos y las suyas propias, junto con los conceptos matemáticos que las caracterizan. De hecho, así es como aparece en gran parte de libros y artículos de los expertos en la materia. El capítulo se ha escrito siguiendo [6], [7],[9] y [17].

#### Propiedades

Los cuasicristales preservan varias características de los cristales perfectos: **finitud local**, **extensión en todo el espacio**, **finitud de las configuraciones locales salvo traslación** y **repetitividad**. Los **conjuntos de Meyer** verifican las tres primeras propiedades, mientras que los retículos son repetitivos. En efecto, los cristales perfectos poseen dichas características.

Respecto a la diferencia, la propiedad que no conservan es la periodicidad ( $per(A) = \mathcal{L}$  con  $\mathcal{L}$  retículo). Como ya se ha mencionado anteriormente, existen diferentes definiciones de los cuasicristales según sus simetrías. Independientemente de si poseen simetrías  $n$ -rotacionales que van en contra del TRC, los cuasicristales pueden ser no periódicos o presentar simetría traslacional en alguna dirección, pero no en  $n$  independientes (siendo  $\mathbb{R}^n$  el espacio). Un ejemplo de este tipo de cuasicristales fue el descubierto por Ishimasa y Nissen, que tenía simetría 12-rotacional [18]. Los ejemplos que aparecen en este documento son cuasicristales no periódicos.

Haciendo un breve inciso, advertir que en la mayoría de libros y artículos consultados, **aperiodicidad y no periodicidad aparecen como sinónimos**. En [7] son conceptos distintos, verificando que Aperiódico  $\Rightarrow$  No periódico. Por lo tanto, respecto a la periodicidad del conjunto, sí que son sinónimos ( $per(A) = 0$ ). Para no complicar en exceso al lector, se utilizarán indistintamente los dos términos.

Aún habiendo definido formalmente todas las propiedades, no se ha encontrado un conjunto de condiciones geométricas que caractericen los cuasicristales. Los conjuntos de Meyer presentan casi todas las propiedades, pero no están relacionados con la periodicidad. Sin embargo, existe un método de construcción basado en la **proyección** de retículos de dimensiones superiores, tal que con una serie de hipótesis iniciales, los conjuntos resultantes presentan todas las propiedades mencionadas y poseen patrones de difracción discretos puros. Estos se denominan **conjuntos modelo**, obtenidos a partir de un esquema **de corte y proyección (C&P)**. Advertir al lector que a menudo se suele denominar C&P al propio conjunto modelo.

### 3.1. Conjuntos Modelo

Un **esquema C&P** se define como la tripleta  $(\mathbb{R}^d, H, \mathcal{L})$ , donde  $H$  es un grupo abeliano localmente compacto (LCAG),  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^d \times H$  un retículo y se tienen las dos proyecciones canónicas  $\pi : \mathbb{R}^d \times H \rightarrow \mathbb{R}^d$  y  $\pi_{int} : \mathbb{R}^d \times H \rightarrow H$ , verificando las hipótesis:  $\pi|_{\mathcal{L}}$  inyectiva y  $\pi_{int}(\mathcal{L})$  denso en  $H$ . Como  $\mathbb{R}^l$  es LCAG para cualquier  $l$ , se simplifica la exposición suponiendo que  $H = \mathbb{R}^l$  y  $\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^l$ .

Se denomina **espacio físico** a  $\mathbb{R}^d$ , **espacio interno** a  $\mathbb{R}^l$  y espacio de inmersión a  $\mathbb{R}^n$ . Además, se denota  $L = \pi(\mathcal{L})$ . La proyección  $\pi$  es una biyección entre  $\mathcal{L}$  y  $L$ , por lo que se puede definir la aplicación

$$\begin{aligned} \star : L &\longrightarrow \mathbb{R}^l \\ x &\longmapsto x^\star = \pi_{int}((\pi|_{\mathcal{L}})^{-1}(x)) \end{aligned}$$

donde  $(\pi|_{\mathcal{L}})^{-1}(x)$  es el único punto de  $\mathcal{L} \cap \pi^{-1}(x)$ . Se denomina aplicación estrella. La  $\star$ -imagen se denota  $L^\star$ . Por construcción,  $\mathcal{L}$  se puede ver como una inmersión diagonal de  $L$ , es decir,  $\mathcal{L} = \{(x, x^\star) \mid x \in L\}$ . Se resume el esquema C&P en el siguiente diagrama, en el que el contenido  $\pi_{int}(\mathcal{L}) \subset \mathbb{R}^l$  es denso.

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{R}^d & \xleftarrow{\pi} & \mathbb{R}^n & \xrightarrow{\pi_{int}} & \mathbb{R}^l \\ \cup & & \cup & & \cup \\ \pi(\mathcal{L}) & \xleftarrow{1-1} & \mathcal{L} & \xrightarrow{\quad} & \pi_{int}(\mathcal{L}) \\ \parallel & & & & \parallel \\ L & \xrightarrow{\quad \star \quad} & & & L^\star \end{array}$$

Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema C&P y dado  $W \subset \mathbb{R}^l$ , se define  $\Sigma(W) = \{x \in L \mid x^\star \in W\}$ . El conjunto  $W$  recibe el nombre de **ventana de aceptación**. Si  $W$  es relativamente compacto, con interior no vacío, se dice que  $\Sigma(W)$  o cualquier trasladado  $t + \Sigma(W)$  con  $t \in \mathbb{R}^d$  es un **conjunto modelo**. Además, si  $L^\star \cap \partial W = \emptyset$ , se conoce como **modelo genérico**. En caso contrario es un modelo singular. Si la medida de Haar de  $\partial W$  es nula, se denomina **modelo regular**. Esta medida se puede sustituir por la medida de Lebesgue en  $\mathbb{R}^l$ .



La definición formaliza la noción de un conjunto que se obtiene como proyección de un retículo de dimensión superior. Los puntos seleccionados para la proyección caen dentro de una región acotada cuando son proyectados en el espacio interno. Ahora bien, a partir de las hipótesis mencionadas, se procede a demostrar que los conjuntos modelo verifican las propiedades de los cuasicristales aperiódicos.

**Lema 3.1.** *Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema C&P y  $U \subset \mathbb{R}^l$  un abierto no vacío. Entonces existe un compacto  $K \subset \mathbb{R}^d$  tal que  $\mathbb{R}^n = \mathcal{L} + (K \times U)$*

*Demostración.* Como  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  es un retículo, existe un compacto  $C \subset \mathbb{R}^n$  tal que  $\mathbb{R}^n = \mathcal{L} + C$ . Las proyecciones  $K_1 = \pi(C) \subset \mathbb{R}^d$  y  $K_2 = \pi_{int}(C) \subset \mathbb{R}^l$  son de nuevo compactas y se tiene que  $\mathbb{R}^n = \mathcal{L} + (K_1 \times K_2)$ . Ahora bien, por la densidad de  $\pi_{int}(\mathcal{L})$  en  $\mathbb{R}^l$ , se da que  $\mathbb{R}^l = \bigcup_{p \in \mathcal{L}} (\pi_{int}(p) + U)$  para cualquier  $U$  abierto de  $\mathbb{R}^l$ . Como  $K_2 \subset \mathbb{R}^l$  es un compacto, existe un subrecubrimiento finito

$$K_2 \subset \bigcup_{q \in F} (\pi_{int}(q) + U)$$

siendo  $F \in \mathcal{L}$  un conjunto finito. Así pues, sea  $z \in \mathbb{R}^n$ , se tiene que  $\exists p \in \mathcal{L}$  tal que  $z - p \in K_1 \times K_2$ . Además,  $\exists q \in F$  con  $\pi_{int}(z - p - q) \in U$ . Por lo tanto,  $\pi(z - p - q) \in K_1 - \pi(F)$ , donde  $K = K_1 - \pi(F) \subset \mathbb{R}^d$  es compacto y  $z = p + q + (z - p - q) \in \mathcal{L} + (K \times U)$ .  $\square$

**Proposición 3.2.** *Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema C&P y  $A = t + \Sigma(W)$  con  $t \in \mathbb{R}^d$  y  $W \subset \mathbb{R}^l$  una ventana de aceptación. Si  $W$  es relativamente compacto,  $A$  es FLC y, por tanto, uniformemente discreto. Si  $W^\circ \neq \emptyset$ ,  $A$  es relativamente denso. Además, si  $A$  es un conjunto modelo, también es un conjunto de Meyer.*

*Demostración.* Supongamos  $W$  relativamente compacto. Veamos que  $A = t + \Sigma(W)$  es localmente finito. Basta probar que  $\Sigma(W)$  lo es. Para cada  $K \subset \mathbb{R}^d$  compacto se tiene que  $K \cap \Sigma(W) = \pi((K \times W) \cap \mathcal{L}) \subset \pi((K \times \overline{W}) \cap \mathcal{L})$ . Como  $\mathcal{L}$  es localmente finito y  $K \times \overline{W} \subset \mathbb{R}^n$  es compacto, se tiene que  $K \cap \Sigma(W)$  es finito. Así pues,  $\Sigma(W)$  es localmente finito y por tanto también lo es  $A$ . Para demostrar que  $A$  tiene FLC, por la *Proposición 2.3* será suficiente comprobar que  $A - A$  es localmente finito. Observamos que

$$A - A = \Sigma(W) - \Sigma(W) = \{x - y \mid x, y \in L; x^*, y^* \in W\} = \{z \in L \mid z^* \in W - W\} = \Sigma(W - W)$$

Como  $W$  es relativamente compacto, es decir, acotado,  $W - W$  también lo es. El argumento anterior nos permite concluir que  $A$  tiene FLC. En consecuencia, por la *Proposición 2.2*, es uniformemente discreto. Del mismo modo se obtiene que  $A - A$  es uniformemente discreto. Por otra parte, si  $W^\circ \neq \emptyset$ , existe  $U \subset (-W)$ . Por el *Lema 3.1*, existe  $K \subset \mathbb{R}^d$  compacto tal que  $\mathbb{R}^n = \mathcal{L} + (K \times U)$ . Por lo tanto, para  $x \in \mathbb{R}^d$  existen  $s \in L$ ,  $k \in K$  y  $u \in U$  tales que  $(x, 0) = (s, s^*) + (k, u)$ . Esto significa que  $s^* = -u \in W$ , lo que implica que  $x = s + k \in \Sigma(W) + K$ . Así pues,  $\mathbb{R}^d = \Sigma(W) + K$ , es decir,  $\Sigma(W)$  y cualquier trasladado suyo es relativamente denso.

Queda comprobar que si  $A$  es un conjunto modelo, también lo es de Meyer. Como  $A$  es relativamente denso,  $A - x$  con  $x \in A$  también lo es. De hecho tienen el mismo radio de recubrimiento. Por lo tanto  $A - A = \bigcup_{x \in A} (A - x)$  es relativamente denso y  $A$  verifica la *Definición 2.5*, es decir, es un conjunto de Meyer.  $\square$

Bajo las hipótesis iniciales de densidad en el espacio interno e inyectividad sobre el espacio físico, junto con los requisitos de la ventana, se tiene que **los conjuntos modelo son conjuntos**

**de Meyer.** En cuanto a la repetitividad, en [19] se demuestra que si  $A$  es un modelo genérico, entonces es repetitivo. Por el teorema de Baire, siempre se puede escoger una ventana que verifique dicha condición [20]. Además, en el caso de que el modelo sea regular, la frecuencia de repetición de cada  $r$ -estrella está bien definida, en el sentido de que el número de apariciones salvo traslación por unidad de volumen en  $B_r(0)$  converge cuando  $r \rightarrow \infty$ .

La clave para comprobar la frecuencia de repetición es que  $A^* = \{x^* \mid x \in A\}$  está uniformemente distribuido en  $W$ . Esto significa que para cada abierto  $U \subset W$ ,

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\text{card}(A_R^* \cap U)}{\mu(W)} = \mu(U)/\mu(W)$$

siendo  $A_R = A \cap B_R(0)$  y  $\mu(A)$  la medida de Lebesgue de  $A$ . Se presenta el teorema que lo caracteriza, cuya demostración se encuentra en [20], y acto seguido la fórmula que refleja la frecuencia de repetición.

**Teorema 3.3.** Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema C&E y  $A = \Sigma(W)$  un modelo regular con ventana  $W$ . Ordenando los puntos de  $A$  según su distancia al origen,  $(x_i)_{i \in \mathbb{N}}$ , se tiene que la secuencia  $(x_i^*)_{i \in \mathbb{N}}$  está uniformemente distribuida en  $W$ .

**Proposición 3.4.** Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema C&E y  $A$  un modelo regular con ventana  $W$ . Si  $P \subset A$  es una  $r$ -estrella, su frecuencia relativa viene dada por

$$\text{relfrec}_A(P) = \frac{\text{vol}(\cap_{x \in P}(W - x^*))}{\text{vol}(W)}$$

que está asociada a la frecuencia absoluta

$$\text{absfrec}_A(P) = \text{dens}(A) \text{relfrec}_A(P)$$

donde la densidad de  $A$  viene dada por

$$\text{dens}(A) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\text{card}(A_r)}{\text{vol}(B_r(0))}$$

*Demostración.* Sea  $P \subset A$  una  $r$ -estrella, por lo que  $x^* \in W \forall x \in P$ , que es equivalente a  $0 \in W_P = \cap_{x \in P}(W - x^*) \neq \emptyset$ . De hecho,  $W_P$  sigue siendo relativamente compacto, pues es la intersección finita de conjuntos relativamente compactos. Ahora bien,  $t + P \subset A \Leftrightarrow t \in L$  y  $t^* \in W_P$ . Por una parte, si  $t + P \subset A$ , implica que  $\forall x \in P$  existe  $y_x \in A$  tal que  $t = y_x - x$  y  $t^* = y_x^* - x^*$ . Así pues,  $t \in A - A \subset L - L \subset L$  y  $t^* \in W_P$ . Por otra parte, si  $t \in L$  y  $t^* \in W_P$ , dado un  $x \in P$ , se tiene que  $t + x \in L$  y  $t^* + x^* \in W$ , es decir,  $t + x \in A$ . Por lo tanto, una vez demostrada la caracterización, se tiene que el número de veces que aparece la  $r$ -estrella

$$\text{rep}(P) = \{t \in L \mid t + P \subset A\} = \{t \in L \mid t^* \in W_P\} = \Sigma(W_P)$$

Por el Teorema 3.3, la frecuencia relativa de  $P$  por punto de  $A$  viene dada por  $\frac{\text{vol}(W_P)}{\text{vol}(W)}$   $\square$

Se ha incluido esta demostración en el documento porque aparece el concepto de  $W_P \subset W$ , que se suele denominar como ventana del conglomerado  $P$ . Además, si  $W$  es sencilla, se puede utilizar la Proposición 3.4 para hallar las frecuencias de los conglomerados de un modelo regular.

Aún falta hablar de la periodicidad. Como ya se ha mencionado anteriormente, este capítulo está centrado en la obtención de conjuntos aperiódicos con las propiedades de los cristales. Esto significa que no puede existir ningún  $t \in \mathbb{R}^d$  tal que  $t + \Sigma(W) \subset \Sigma(W)$ . Primero veamos que sucede si no se añade ninguna restricción:

Sea  $t \in \ker(\star)$ , es decir,  $t^\star = \pi_{int}((\pi|_{\mathcal{L}})^{-1}(t)) = 0 \Leftrightarrow (\pi|_{\mathcal{L}})^{-1}(t) \in \ker(\pi_{int}) = \mathbb{R}^d \times \{0\} \Leftrightarrow t \in \mathbb{R}^d \cap \mathcal{L}$ . Sea  $x \in \Sigma(W)$ , se tiene que  $(t+x)^\star = t^\star + x^\star = x^\star \in W$ . Esto significa que  $t+x \in \Sigma(W)$  y por tanto  $t + \Sigma(W) \subset \Sigma(W)$ . Se tiene que  $\ker(\star) \subset \text{per}(\Sigma(W))$ .

Por tanto, la **inyectividad de  $\star$**  es una condición necesaria para tener aperiodicidad. A continuación se demuestra que esta condición es suficiente para obtener modelos aperiódicos.

**Proposición 3.5.** *Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema CÉP y  $A$  un modelo con ventana  $W$ . Si  $\star$  es inyectiva, entonces  $A$  es aperiódico.*

*Demostración.* Sea  $t \in \mathbb{R}^d$  tal que  $t + \Sigma(W) \subset \Sigma(W)$  y sea  $y \in \Sigma(W)$ , entonces se da  $t+y = z$  para algún  $z \in L$  con  $z^\star \in W$ . De hecho,  $\forall x \in L$  con  $x^\star \in W$ , se tiene que  $nt+x \in L$  con  $nt^\star+x^\star \in W$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ . Como  $W$  está acotado,  $t^\star = 0$ , es decir,  $t \in \ker(\star)$  y se tiene que  $\text{per}(\Sigma(W)) \subset \ker(\star)$ . Además, por la inyectividad de  $\star$ , se tiene que  $t = 0$ .  $\square$

El hecho de que  $\pi_{int}|_{\mathcal{L}}$  sea inyectiva equivale a  $\mathbb{R}^d \cap \mathcal{L} = \{0\}$ , en cuyo caso  $\mathbb{R}^d$  se denomina **totalmente irracional**. En  $\mathbb{R}^n = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^l$  los espacios sí son ortogonales. Por último, se presentan dos teoremas relativos a los conjuntos modelo que muestran su íntima relación con los conjuntos de Meyer, así como con los patrones de difracción discretos puros.

**Teorema 3.6.** *Sea  $(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^l, \mathcal{L})$  un esquema CÉP y  $A$  un modelo regular con  $W = \overline{W^\circ}$ . Entonces  $A$  es un conjunto de Patterson cuyo espectro  $\sigma_P(A)$  verifica que*

$$\sigma_P(A) \subseteq \pi(\mathcal{L}^*)$$

Este teorema indica que los modelos regulares tienen patrones de difracción discretos con puntos brillantes, localizados en los puntos proyectados del retículo dual. Schlottman demostró el resultado en [21] a través de sistemas dinámicos y sus relaciones con los conjuntos de Delone de tipo finito.

**Teorema 3.7.** *Sea  $A \subset \mathbb{R}^d$  un conjunto. Las siguientes propiedades son equivalentes.*

1.  *$A$  es de Meyer.*
2.  *$A$  es de Delone y existen un conjunto modelo  $\Sigma(W)$  y un conjunto finito  $F$  tales que  $A \subseteq \Sigma(W) + F$ .*

Meyer demostró en [22] este resultado. Por lo tanto, los conjuntos de Meyer y los conjuntos modelos están íntimamente relacionados. Sin embargo, difieren en la difracción, pues los conjuntos modelo generan patrones discretos puros, mientras que los conjuntos de Meyer pueden generar no discretos.

Los conjuntos modelo son una gran aproximación de los cuasicristales. Fueron introducidos por Meyer antes del descubrimiento de 1982, en [22]. Presentan todas sus propiedades y además pueden reflejar la aperiodicidad que los caracteriza. Sin embargo, no todos los cuasicristales se obtienen a partir de los conjuntos modelo y viceversa.

### 3.2. Ejemplos de conjuntos modelo

En esta sección se presentan dos ejemplos de conjuntos modelo con distintos esquemas C&P. El primero desarrolla un modelo unidimensional aperiódico. Es de gran interés por su relación con un método de obtención de estructuras aperiódicas: la sustitución o inflación. Existen otros ejemplos que también se relacionan con reglas de sustitución, como la conocida cadena de Fibonacci, detallado en [7] y [23].

El segundo ejemplo consiste en una familia de modelos bidimensionales que preservan simetrías  $k$ -rotacionales. Por lo tanto, aquellos que presenten simetrías prohibidas por el TRC representan cuasicristales. De hecho, a pesar de su estrecha relación con las teselaciones aperiódicas, tan solo se muestran los puntos del conjunto. En el siguiente capítulo se introducen las teselaciones.

#### Ejemplo unidimensional: cadena del número de plata

Los números metálicos se definen como las raíces de la familia de polinomios  $\{x^2 - px - q \mid p, q \in \mathbb{N}\}$ . El más famoso es el número de oro, también conocido como número áureo,  $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ . No obstante, este ejemplo está basado en el número de plata  $\delta_S = 1 + \sqrt{2}$ . Partiendo de las reglas de sustitución:

$$\begin{aligned} a &\rightarrow b \\ b &\rightarrow bab \end{aligned}$$

tomando  $a$  y  $b$  intervalos de longitud 1 y  $\delta_S$  respectivamente, comenzando con dos intervalos  $b$  opuestos en torno al origen, iterando la sustitución y escogiendo el extremo izquierdo de cada intervalo, se obtiene una sucesión, en el límite, bi-infinita de puntos  $A$ .

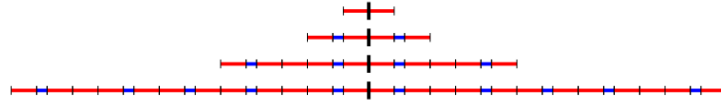


Figura 9: Iteración para obtener la cadena del número de plata  
[24]

En el *Capítulo 4* de [7] se demuestra que esta sucesión es un subconjunto de  $L = \mathbb{Z}[\sqrt{2}] = \{m + n\sqrt{2} \mid m, n \in \mathbb{Z}\}$ . Observar que  $L$  es denso en  $\mathbb{R}$ , pues dado  $x \in \mathbb{Z}[\sqrt{2}]$  se tiene que  $x\mathbb{Z} = \{xz \mid z \in \mathbb{Z}\} \subset \mathbb{Z}[\sqrt{2}]$  y la sucesión  $\{(\sqrt{2} - 1)^n\}_{n=1}^{\infty}$ , que está contenida en  $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$ , converge a 0 cuando  $n \rightarrow \infty$ . Por tanto,  $\forall \epsilon > 0 \exists x \in \mathbb{Z}[\sqrt{2}]$  tal que  $0 < x < \epsilon$ ; y  $\forall r \in \mathbb{R} \exists n \in \mathbb{N}$  con  $(n-1)x \leq r < nx$ . Luego existe algún elemento de  $\mathbb{Z}[\sqrt{2}]$  a distancia de  $r$  menor que  $x$  y por tanto menor que  $\epsilon$ . Ahora bien, tomando la conjugación algebraica, es decir, el homomorfismo dado por  $\sqrt{2} \mapsto -\sqrt{2}$  y denotando el conjugado de  $x$  como  $x'$ , se define

$$\begin{aligned} \star : L &\longrightarrow L \\ x &\longmapsto x' \end{aligned}$$

Sumergiendo diagonalmente  $L$  en  $\mathbb{R}^2$  como se ha mencionado en la sección anterior, se tiene que  $\mathcal{L} = \{(x, x^*) \mid x \in \mathbb{Z}[\sqrt{2}]\} = \{(m + n\sqrt{2}, m - n\sqrt{2}) \mid m, n \in \mathbb{Z}\}$  es un retículo con una base dada por  $B = \{(1, 1), (\sqrt{2}, -\sqrt{2})\}$ .

La proyección  $\pi$  se realiza sobre el eje de abscisas y se tiene que  $\pi(\mathcal{L}) = L$ . Además, sean  $x = m + n\sqrt{2}$  e  $y = p + q\sqrt{2}$  con  $m, n, p, q \in \mathbb{Z}$  tales que  $x = y$ , se tiene que  $m = p$  y  $n = q$ . Para ver esto, supongamos  $n \neq q$ . Entonces  $\sqrt{2} = \frac{m-p}{q-n} \in \mathbb{Q}$ , pero  $\sqrt{2}$  es irracional. Por tanto  $n = q$  y para  $x = y$  ha de cumplirse que  $m = p$ . De aquí se deduce que  $x^* = y^*$ , y por tanto  $\pi|_{\mathcal{L}}$  es inyectiva, así como  $\star$ .

Tomando  $\pi_{int}$  como la proyección sobre el eje de ordenadas, de nuevo se tiene  $\pi_{int}(\mathcal{L}) = L$ . Por lo tanto,  $\pi_{int}(\mathcal{L})$  es denso en el espacio interno y el esquema definido es un **C&P**. Además, por construcción se tiene que  $\mathcal{L} \cap \overline{OX} = \{0\}$ , es decir,  $\pi_{int}|_{\mathcal{L}}$  es inyectiva. He aquí el diagrama, donde los dos contenidos laterales son densos:

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{R} & \xleftarrow{\pi} & \mathbb{R}^2 & \xrightarrow{\pi_{int}} & \mathbb{R} \\ \cup & & \cup & & \cup \\ \mathbb{Z}[\sqrt{2}] & \xleftarrow{1-1} & \mathcal{L} & \xrightarrow{1-1} & \mathbb{Z}[\sqrt{2}] \\ \parallel & & & & \parallel \\ L & \xrightarrow{\star} & & & L^* \end{array}$$

Aún falta establecer la ventana  $W$ , tratando de obtener  $\Sigma(W) = A$ . Para ello, primero observar que al aplicar la regla de sustitución, el tamaño se rescala por  $\delta_S$ , pues  $\delta_S * 1 = \delta_S$  y  $\delta_S * \delta_S = 2\delta_S + 1$ . Se divide  $A$  en dos subconjuntos disjuntos  $A_a$  y  $A_b$ , tales que representan los extremos izquierdos de cada tipo de intervalo y verifican:

$$\begin{aligned} A_a &= \delta_S A_b + \delta_S \\ A_b &= \delta_S A_b \cup (\delta_S A_b + (1 + \delta_S)) \cup \delta_S A_a \end{aligned}$$

Aplicando la misma conjugación anterior y definiendo  $W_a = \overline{A_a^*}$ ,  $W_b = \overline{A_b^*}$  se tiene que

$$\begin{aligned} W_a &= \delta_S^* W_b + \delta_S^* \\ W_b &= \delta_S^* W_b \cup (\delta_S^* W_b + (1 + \delta_S^*)) \cup \delta_S^* W_a \end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones, con constante de contracción  $\delta_S^* < 1$ , tiene una única solución. Se demuestra mediante la teoría de Hutchinson [25], que es una aplicación del teorema del punto fijo de Banach en conjuntos compactos. Resolviendo el sistema se obtiene

$$W_a = \left[ -\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}-2}{2} \right] \quad W_b = \left[ \frac{\sqrt{2}-2}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right]$$

Tomando  $W = W_a \cup W_b = [-\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2]$  como ventana de aceptación, se tiene que  $\Sigma(W) = \{x \in L \mid x^* \in W\}$  es un conjunto modelo, verificando  $\Sigma(W) = A$ . La comprobación se encuentran en el *Capítulo 7 de [7]*. De hecho, el modelo es regular y genérico. En efecto,  $\partial W = \{-\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2\}$  es de medida nula en  $\mathbb{R}$ . Por otra parte,  $\partial W \cap L^* = \{-\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2\} \cap \mathbb{Z}[\sqrt{2}] = \emptyset$ , pues  $\forall m, n \in \mathbb{Z}$   $m + n\sqrt{2} \neq \pm\sqrt{2}/2$ . Además, como ya vimos que  $\pi_{int}|_{\mathcal{L}}$  era inyectiva, se deduce que  $A$  es aperiódica.

### Ejemplo bidimensional: modelos ciclotómicos

Sea  $\mathcal{U}_n = \{\zeta \in \mathbb{C} \mid \zeta^n = 1\}$  el conjunto de las raíces  $n$ -ésimas de la unidad. Todas son de la forma  $\zeta = e^{2k\pi i/n}$  con  $1 \leq k \leq n$ . El conjunto  $\mathcal{U}_n$ , con la multiplicación, es un grupo cíclico de orden

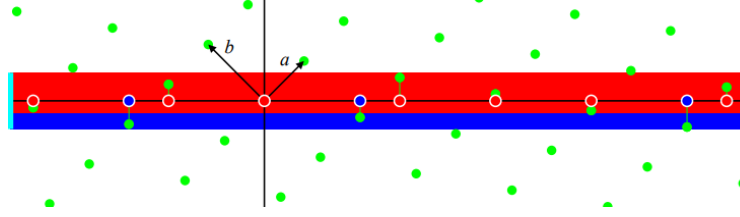


Figura 10: Esquema C&P y conjunto modelo para construir la cadena del número de plata [24]

$n$ . Los generadores, denominados raíces primitivas  $n$ -ésimas, son los  $\zeta^k$  tales que  $\text{mcd}(k, n) = 1$ . El conjunto de las raíces primitivas  $n$ -ésimas se denota como  $\mathcal{P}_n$  y su cardinal es  $\varphi(n)$  (la función de Euler introducida en la Sección 2.3). El polinomio  $\Phi_n(t) = \prod_{\zeta \in \mathcal{P}_n} (t - \zeta) \in \mathbb{C}[t]$  se denomina  $n$ -ésimo polinomio ciclotómico. Por su construcción, tiene grado  $\varphi(n)$  y sus raíces son las primitivas de la unidad. Además, verifica que  $\Phi_n(t) \in \mathbb{Z}[t]$  y es irreducible en  $\mathbb{Q}[t]$ .

Sea  $\zeta_n$  una raíz primitiva  $n$ -ésima, se define  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$  como el menor subcuerpo de  $\mathbb{C}$  que contiene tanto a  $\mathbb{Q}$  como a  $\zeta_n$ . Por otra parte, se define el homomorfismo evaluación  $ev_{\zeta_n} : \mathbb{Q}[t] \rightarrow \mathbb{C}$ ,  $g \mapsto g(\zeta_n)$ . El polinomio  $\Phi_n(t)$  genera el ideal  $\ker ev_{\zeta_n}$  y se denomina **polinomio mínimo** de  $\zeta_n$  sobre  $\mathbb{Q}$ . Por lo tanto,  $\zeta_n$  es algebraico y se tiene que  $\mathbb{Q}(\zeta_n) = \mathbb{Q}[\zeta_n]$ . Por el primer teorema de isomorfía para anillos se tiene que  $\mathbb{Q}(\zeta_n) = \mathbb{Q}[\zeta_n] \simeq \mathbb{Q}[t]/(\Phi_n(t))$  y  $\mathbb{Q}(\zeta_n) = \{\lambda_0 + \lambda_1 \zeta_n + \cdots + \lambda_{\varphi(n)-1} \zeta_n^{\varphi(n)-1}\}$ . De hecho, como todas las raíces de  $\Phi_n(t)$  están en  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$ ,  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$  es el cuerpo de descomposición de  $\Phi_n(t)$ . Así mismo, la extensión  $\mathbb{Q}(\zeta_n)|\mathbb{Q}$  es finita, con grado  $[\mathbb{Q}(\zeta_n) : \mathbb{Q}] = \varphi(n)$ .

El grupo de Galois de la extensión  $\mathbb{Q}(\zeta_n)|\mathbb{Q}$  es el grupo de automorfismos de  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$  que dejan fijo  $\mathbb{Q}$ . Se denota como  $G = G(\mathbb{Q}(\zeta_n) : \mathbb{Q})$  y en efecto forman un grupo con la operación de composición. Cada automorfismo  $\phi \in G$  viene unívocamente determinado por la imagen de  $\zeta_n$ . Además, esta imagen ha de ser raíz de  $\Phi_n(t)$ . Por lo tanto,  $\phi(\zeta_n) = \zeta_n^k$  con  $\text{mcd}(k, n) = 1$  y  $\text{ord}(G) = [\mathbb{Q}(\zeta_n) : \mathbb{Q}] = \varphi(n)$ . Esto significa que  $G$  es isomorfo al grupo multiplicativo de las unidades de  $\mathbb{Z}_n$ , denotado por  $\mathbb{Z}_n^*$ .

Estos resultados de la teoría de Galois [26] son útiles para construir conjuntos modelo que presenten simetrías  $n$ -rotacionales. Antes de describirlos, se muestran dos observaciones sobre las raíces  $n$ -ésimas. Se utilizarán proposiciones y enunciados cuyas demostraciones se pueden leer en [27]. Esta fuente describe con todo lujo de detalle los modelos ciclotómicos.

Ahora bien, sea  $\zeta_n = e^{2\pi i/n}$  una raíz primitiva  $n$ -ésima de la unidad. La primera observación es que si  $n$  es impar,  $\mathbb{Q}(\zeta_n) = \mathbb{Q}(\zeta_{2n})$ . Se suele tomar  $n \not\equiv 2 \pmod{4}$  para evitar repeticiones. En cuanto a la demostración, el primer contenido se extrae directamente de que  $\zeta_n = \zeta_{2n}^2$ . Por otra parte,  $-\zeta_{2n} = -e^{2\pi i/2n} = -e^{\pi i/n} = e^{\pi i} e^{\pi i/n} = e^{\pi i(n+1)/n}$ . Como  $n+1$  es par,  $\exists k = (n+1)/2$  y  $-\zeta_{2n} = e^{2\pi i k/n}$ . Además, como  $\text{mcd}(k, n) = \text{mcd}((n+1)/2, n) = \text{mcd}((n+1)/2, (n-1)/2) = \text{mcd}(1, (n-1)/2) = 1$  se tiene que  $-\zeta_{2n}$  es una raíz primitiva  $n$ -ésima y por lo tanto  $\zeta_{2n} \in \mathbb{Q}(\zeta_n)$ .

Sin embargo, si  $n$  es par, las únicas raíces de la unidad que están en  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$  son las propias raíces  $n$ -ésimas. Para la segunda proposición, se define un entero algebraico como un número algebraico con el requisito de que el polinomio mínimo ha de tener coeficientes enteros. Así pues, el anillo de los enteros algebraicos en  $\mathbb{Q}(\zeta_n)$  es  $\mathbb{Z}[\zeta_n] = \{\sum_{i=0}^{\varphi(n)-1} \alpha_i \zeta_n^i \mid \alpha_i \in \mathbb{Z}\}$ , es decir, un  $\mathbb{Z}$ -módulo de rango  $\varphi(n)$ . La demostración se puede encontrar en [28]. Observar que  $\mathbb{Z}[\zeta_3]$  y  $\mathbb{Z}[\zeta_4]$ , que son los anillos de los enteros de Eisenstein y Gauss respectivamente, se corresponden geoméricamente a los re-

tículos cuadrado y hexagonal de la *Figura 6*. Para el resto de  $n \in \mathbb{N}$ , el conjunto  $\mathbb{Z}[\zeta_n]$  es denso en  $\mathbb{R}^2$ .

De ambas proposiciones se extrae que dada una raíz primitiva  $n$ -ésima  $\zeta_n$ , el anillo de los enteros  $\mathbb{Z}[\zeta_n]$  visto como subconjunto de  $\mathbb{C} \simeq \mathbb{R}^2$  presenta simetría  $N$ -rotacional, con  $N = mcm(2, n)$ . Las simetrías vienen dadas por  $x \mapsto \zeta_n x$  si  $N = n$  y  $x \mapsto -\zeta_n x$  si  $N = 2n$ . Este resultado está en consonancia con el TRC, pues los únicos retículos se obtienen con  $n = 4$  y  $n = 3$  (o  $n = 6$ ). Por lo tanto, tomando  $n > 4$  con  $n \not\equiv 2 \pmod{4}$ ,  $\mathbb{Z}[\zeta_n]$  es un buen candidato a conjunto modelo.

Volvamos al grupo de Galois de la extensión  $\mathbb{Q}(\zeta_n)|\mathbb{Q}$ . Tomando un  $n$  que respete las condiciones anteriores, como  $\varphi(n)$  es par y  $G$  es isomorfo a  $\mathbb{Z}_n^*$ , se tiene que los automorfismos de  $G$  vienen en pares conjugados. Escogiendo un representante de cada pareja,  $\sigma_i$ , se sumerge diagonalmente  $\mathbb{Z}[\zeta_n]$  de forma análoga al ejemplo anterior. Generalmente  $\sigma_1$  es la identidad y no la conjugación compleja.

$$\mathcal{L} = \{(z, \sigma_2(z), \dots, \sigma_{\frac{1}{2}\varphi(n)}(z)) \mid z \in \mathbb{Z}[\zeta_n]\} \subset \mathbb{C}^{\frac{1}{2}\varphi(n)} \simeq \mathbb{R}^{\varphi(n)}$$

De nuevo en [27] queda demostrado que  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^{\varphi(n)-2}$  es un retículo con una base dada por  $\{\sigma(1), \sigma(\zeta_n), \dots, \sigma(\zeta_n^{\varphi(n)-1})\}$ , donde  $\sigma: \mathbb{Z}[\zeta_n] \rightarrow \mathbb{R}^{\varphi(n)}$  viene dada por  $\sigma(z) = (z, \sigma_2(z), \dots, \sigma_{\frac{1}{2}\varphi(n)}(z))$ . De hecho,  $\mathcal{L}$  preserva la simetría  $N$ -rotacional de  $\mathbb{Z}[\zeta_n]$ . Para verlo, basta con comprobar que  $\sigma_j(z) * \sigma_j(\zeta_n) = \sigma_j(z * \zeta_n) \in \mathcal{L}$ , suponiendo que  $\sigma_j(\zeta_n) = \zeta_n^j$  con  $mcd(j, n) = 1$ . En efecto, sea  $z = \sum_{i=0}^{\varphi(n)-1} \lambda_i \zeta_n^i \in \mathbb{Z}[\zeta_n]$ , se tiene que  $\sigma_j(z) * \sigma_j(\zeta_n) = \sum_{i=0}^{\varphi(n)-1} \lambda_i \zeta_n^{ij} * (\zeta_n^j) = \sum_{i=0}^{\varphi(n)-1} \lambda_i \zeta_n^{((ij)+j) \bmod n} = \sum_{i=0}^{\varphi(n)-1} \lambda_i \zeta_n^{((i+1)*j) \bmod n} = \sigma_j(z * \zeta_n)$ .

La proyección  $\pi$  se define sobre la primera coordenada, es decir,  $\pi(\mathcal{L}) = \mathbb{Z}[\zeta_n]$ . Por la propia construcción de  $\mathcal{L}$ , se tiene que  $\pi|_{\mathcal{L}}$  es inyectiva. La aplicación  $\star$  viene dada por  $z \mapsto (\sigma_2(z), \dots, \sigma_{\frac{1}{2}\varphi(n)}(z))$ . Por la existencia de un número de Pisot de orden  $\varphi(n)/2$  en  $\mathbb{Z}[\zeta_n + \bar{\zeta}_n]$  [29], se deduce que  $\mathbb{Z}[\zeta_n]^* = \pi_{int}(\mathcal{L})$  es un conjunto denso en  $\mathbb{R}^{\varphi(n)-2}$ . Así pues, se verifican todas las hipótesis necesarias para que el siguiente esquema sea C&P. Observar que los dos contenidos laterales son densos en sus respectivos espacios.

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{R}^2 & \xleftarrow{\pi} & \mathbb{R}^{\varphi(n)} & \xrightarrow{\pi_{int}} & \mathbb{R}^{\varphi(n)-2} \\ \cup & & \cup & & \cup \\ \pi(\mathcal{L}) & \xleftarrow{1-1} & \mathcal{L} & \xrightarrow{\quad} & \pi_{int}(\mathcal{L}) \\ \parallel & & & & \parallel \\ \mathbb{Z}[\zeta_n] & \xrightarrow{\quad} & \star & \xrightarrow{\quad} & \mathbb{Z}[\zeta_n]^* \end{array}$$

Por último, falta por determinar la ventana de aceptación. Tomando cualquier  $W \subset \mathbb{R}^{\varphi(n)-2}$  relativamente compacto con interior no vacío, se tiene que el conjunto  $\Sigma(W) = \{x \in \mathbb{Z}[\zeta_n] \mid x^* \in W\}$  o cualquier trasladado suyo  $A_t = t + \Sigma(W)$  es un conjunto modelo. Este tipo de conjuntos modelo se denominan ciclotómicos. Son aperiódicos cuando  $n \notin \{3, 4, 6\}$ , pues cada  $\sigma_i$  es inyectiva y por inducción en  $\varphi(n)$  la aplicación  $\star$  también lo es. Existen varios ejemplos clásicos ( $n \in \{5, 8, 12\}$ ) de modelos ciclotómicos aperiódicos con simetría  $n$ -rotacional. En los tres casos se tiene que  $\varphi(n) = 4$ , lo que significa que el retículo original se encuentra en  $\mathbb{R}^4$ . Observar que respeta el *Teorema 2.18* de la sección del TRC. De hecho, sí se alcanza la dimensión mínima requerida para que el retículo tenga simetría  $N$ -rotacional.

Veamos el ejemplo con  $n = 8$ . Existen 4 raíces primitivas  $\zeta_8^j$  con  $j \in \{1, 3, 5, 7\}$  y el polinomio ciclotómico es  $\Phi_8(t) = t^4 + 1$ . El conjunto  $\mathbb{Z}[\zeta_8]$  tiene simetría 8-rotacional y se toma  $\sigma_2(\zeta_8) = \zeta_8^3$ .

Por lo tanto, el retículo original es  $\mathcal{L} = \{(z, \sigma_2(z)) \mid z \in \mathbb{Z}[\zeta_8]\}$  y  $\star = \sigma_2$ , es decir,  $\mathcal{L} = \{(\lambda_0 + \lambda_1\zeta_8 + \lambda_2\zeta_8^2 + \lambda_3\zeta_8^3, \lambda_0 + \lambda_3\zeta_8 - \lambda_2\zeta_8^2 + \lambda_1\zeta_8^3) \mid \lambda_i \in \mathbb{Z}\} \subset \mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{R}^4$ .

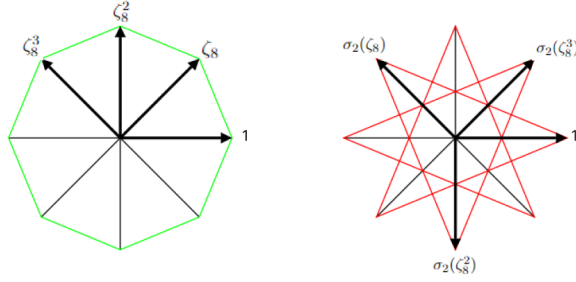


Figura 11: Raíces 8-ésimas que forman base de  $\mathbb{Z}[\zeta_8]$  y la aplicación de  $\sigma_2$  sobre ellas [24]

Sea  $W \subset \mathbb{R}^2$  un octágono regular centrado en el origen, cuyos lados, unitarios, son perpendiculares a alguna raíz 8-ésima. La ventana  $W$  interseca al semieje positivo de abscisas en  $\delta_S/2 = (1 + \sqrt{2})/2$  (se ve con  $\tan(\pi/8) = a/2$  siendo  $a$  el radio interno). Se denota  $r$  como la recta paralela al eje de ordenadas que pasa por ese punto. Como las raíces 8-ésimas son de la forma  $(0, \pm 1)$ ,  $(\pm 1, 0)$  o  $(\pm\sqrt{2}/2, \pm\sqrt{2}/2)$ , la primera coordenada en la base canónica de los puntos de  $\mathbb{Z}[\zeta_8]$  viene dada por  $a_r = \alpha_0 + \alpha_1(\sqrt{2}/2)$  con  $\alpha_0, \alpha_1 \in \mathbb{Z}$ . Observar que  $a_r$  nunca va a poder ser  $\delta_S/2$ . Entonces  $r \cap \mathbb{Z}[\zeta_8] = \emptyset$  y por la simetría 8-rotacional de  $W$  y de  $\mathbb{Z}[\zeta_8]$ , se tiene que  $\partial W \cap \mathbb{Z}[\zeta_8] = \emptyset$ . Así pues, el modelo ciclotómico  $A = \Sigma(W) = \{z \in \mathbb{Z}[\zeta_8] \mid z^\star \in W\}$  es genérico, es decir, repetitivo. De hecho, también es regular, pues la frontera de un polígono tiene medida de Lebesgue nula. En la *Figura 12* se observa un conglomerado de una teselación cuyos vértices (puntos azules) son el modelo ciclotómico presentado, que tiene simetría 8-rotacional y es aperiódico.

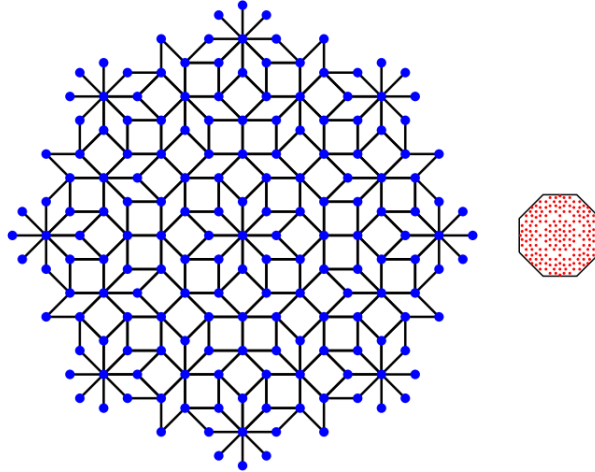


Figura 12: A la izquierda un conglomerado de la teselación de Ammann-Beenker y a la derecha la ventana  $W$  con puntos proyectados en ella

[6]



## 4. Teselaciones aperiódicas

La teoría matemática de las teselaciones es una rama muy antigua, con raíces en la filosofía y las artes. Se centra en las posibles formas de rellenar una superficie o espacio con copias de diferentes figuras, sin solapamientos ni espacios. Además, trata de describir las propiedades de los patrones creados de esta manera. Las teselaciones están muy presentes en el arte, destacando la cultura árabe. De hecho, se suelen concebir como “juegos matemáticos”, pero tienen gran importancia en otras ramas de la ciencia, como por ejemplo la biología o la cristalografía. Se relacionan con las posiciones en el espacio de diferentes elementos.

Una de las cuestiones más importantes es si dado un conjunto finito de figuras poligonales existe un algoritmo capaz de decidir si el plano puede ser teselado mediante copias trasladadas de las figuras. La respuesta es negativa y el argumento se centra en las teselaciones aperiódicas. Por lo tanto, este es un problema indecidible en la teoría de la complejidad computacional. Se recomienda [30] si el lector está interesado en estos aspectos de las teselaciones y la teoría computacional.

Las teselaciones aperiódicas son un buen modelo para explicar las simetrías observadas en los cuasicristales. Sirven de idealización matemática de la estructura atómica, del mismo modo que las teselaciones periódicas asociadas a los retículos con los cristales perfectos. Se presentan tres métodos distintos para obtener teselaciones aperiódicas: los esquemas C&P vistos en el capítulo anterior, las reglas de coincidencia y la inflación. Aunque los ejemplos más habituales puedan ser descritos a partir de los 3 métodos, esto no significa que sean equivalentes. De hecho, existen teselaciones que surgen de la inflación y no se pueden representar mediante un esquema C&P, y viceversa.

El capítulo se basa en las fuentes [2], [6], [7], [24] y [31]. Los métodos de la inflación y las reglas de coincidencia van a ser presentados sin seguir todo el formalismo de algunas de las referencias citadas. Para el lector que esté interesado en el formalismo, se recomienda [7]. Así mismo, [32] contiene un amplio abanico de teselaciones aperiódicas, muy llamativas a la par que bellas, que no han sido expuestas en este documento.

### Definiciones y conceptos matemáticos

Entrando en conceptos matemáticos, se llama **teselación** del espacio  $\mathbb{R}^n$  a toda familia numerable de conjuntos cerrados no vacíos  $\mathcal{T} = \{\mathcal{T}_i \mid i \in I\}$ . Deben verificar que  $\cup_{i \in I} \mathcal{T}_i = \mathbb{R}^n$  y  $\mathcal{T}_i^\circ \cap \mathcal{T}_j^\circ = \emptyset \forall i, j \in I$  ( $i \neq j$ ). Para evitar casos extraños, suponer que cada  $\mathcal{T}_i$  tiene volumen positivo. Observar que no se impone ninguna restricción a las formas de las componentes  $\mathcal{T}_i$  ni a cuántas diferentes hay salvo traslación. En este documento. Si los  $\mathcal{T}_i$  son compactos y  $\mathcal{T}_i = \overline{\mathcal{T}_i^\circ}$ , se dice que la teselación es regular. En este capítulo todos los  $\mathcal{T}_i$  serán politopos, para simplificar la exposición. Además, existirá un número finito de representantes respecto de una clase de equivalencia, fijada por algún criterio  $\mathcal{M}$ . Este criterio puede ser un grupo de transformaciones, decoraciones de los  $\mathcal{T}_i$  (como los colores o marcas distintivas) o ambos.

Dada una teselación  $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^n$  y  $A \subset \mathbb{R}^n$ , se define  $\mathcal{T} \cap A = \{\mathcal{T}_i \in \mathcal{T} \mid \mathcal{T}_i \cap A \neq \emptyset\}$ . También se define  $t + \mathcal{T} = \{t + \mathcal{T}_i \mid \mathcal{T}_i \in \mathcal{T}\}$ . Todos los conceptos presentados en la *Sección 2.1* para conjuntos de puntos se pueden definir de forma análoga para teselaciones. Por ejemplo,  $\mathcal{T}$  es localmente finito si  $\mathcal{T} \cap K$  es finito para cualquier compacto  $K \subset \mathbb{R}^n$ . La única diferencia reside en que en vez de  $r$ -estrellas se consideran conglomerados. En este caso, se definen como los  $\mathcal{T} \cap K$  con  $K \subset \mathbb{R}^n$

compacto. La periodicidad se extiende de la misma forma:  $t \in \mathbb{R}^n$  es un periodo de  $\mathcal{T}$  si  $t + \mathcal{T} = \mathcal{T}$ . Las definiciones de la *Sección 2.2* son equivalentes. Por lo tanto, una **teselación aperiódica** es aquella tal que su conjunto de periodos es  $\text{per}(\mathcal{T}) = \emptyset$ .

**Definición 4.1.** Dadas dos teselaciones  $\mathcal{T}$  y  $\mathcal{T}'$  localmente finitas, se dice que son **localmente indistinguibles (LI)**,  $\mathcal{T} \sim^{LI} \mathcal{T}'$  si cualquier conglomerado de  $\mathcal{T}$  ocurre en  $\mathcal{T}'$  y viceversa. Esto significa que para cualquier compacto  $K \subset \mathbb{R}^n$  existen  $t, t' \in \mathbb{R}^n$  tales que  $\mathcal{T} \cap K = (t' + \mathcal{T}') \cap K$  y  $\mathcal{T}' \cap K = (t + \mathcal{T}) \cap K$ .

Esta propiedad es una relación de equivalencia que divide las teselaciones en clases localmente indistinguibles. La clase de una teselación  $\mathcal{T}$  se denota por  $LI(\mathcal{T})$ . El siguiente lema relaciona  $\text{per}(\mathcal{T})$  con los periodos del resto de teselaciones de su misma clase  $LI$ .

**Lema 4.2.** Dado un periodo  $t \neq 0$  de una teselación localmente finita  $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^n$ , cualquier  $\mathcal{T}' \in LI(\mathcal{T})$  también es  $t$ -periódico. Por lo tanto, el grupo de los periodos es un invariante de las clases  $LI$ .

*Demostración.* Sea  $t \neq 0$  un periodo de  $\mathcal{T}$ . Por lo tanto, se tiene que  $(t + \mathcal{T}) \cap K = \mathcal{T} \cap K$  para cualquier compacto  $K \subset \mathbb{R}^n$ . Supongamos que  $\exists \mathcal{T}' \in LI(\mathcal{T})$  tal que  $t + \mathcal{T}' \neq \mathcal{T}'$ , lo que implica que existe un compacto  $K' \subset \mathbb{R}^n$  con  $(t + \mathcal{T}') \cap K' \neq \mathcal{T}' \cap K'$ . Tomando otro compacto  $K$  que contiene a  $K'$  y  $-t + K'$  y como  $\mathcal{T}' \sim^{LI} \mathcal{T}$ , se da  $\mathcal{T}' \cap K = (x + \mathcal{T}) \cap K$  para algún  $x \in \mathbb{R}^n$ . Por tanto

$$(t + x + \mathcal{T}) \cap K' = (t + \mathcal{T}') \cap K' \neq \mathcal{T}' \cap K' = (x + \mathcal{T}) \cap K'$$

utilizando en la primera igualdad que  $\mathcal{T} \cap (-t + K') = -t + ((t + \mathcal{T}) \cap K')$  para cualquier  $\mathcal{T}$  y  $K$ . Viendo este resultado,  $x + \mathcal{T}$  no es  $t$ -periódico, por lo que tampoco lo es  $\mathcal{T}$ , entrando en contradicción con la hipótesis inicial. Así pues, todas las teselaciones de una clase  $LI$  tienen los mismos periodos.  $\square$

En [7] se describen otras propiedades y conceptos como la derivabilidad local, centrados en formalizar tanto el método de las reglas de coincidencia como el de la inflación.

#### 4.1. Método de proyección

El método de proyección para teselaciones es prácticamente idéntico al presentado en el capítulo anterior. Se parte del mismo esquema C&P, es decir, un retículo  $\mathcal{L} \in \mathbb{R}^n$ , el espacio físico ( $\mathbb{R}^d$ ) y el interno ( $\mathbb{R}^l$ ) con sus respectivas proyecciones ( $\pi$  y  $\pi_{int}$ ) y las mismas hipótesis (inyectividad de  $\pi|_{\mathcal{L}}$  y densidad de  $\pi_{int}(\mathcal{L})$ ). Al buscar teselaciones aperiódicas, se supone de inicio que  $\mathbb{R}^d \cap \mathcal{L} = \{0\}$ . Por lo tanto, nos encontramos en la misma situación de los conjuntos modelo aperiódicos.

La diferencia reside en el conjunto que se proyecta. Es posible proyectar otro conjunto relacionado con el retículo, tal que su proyección siguiendo el esquema C&P de como resultado una teselación. En este contexto se introducen los conceptos de **complejo de Voronoi y de Delone**, que serán esenciales en este método.

#### Complejos de Voronoi y de Delone

Dado un conjunto de puntos localmente finito  $A \subset \mathbb{R}^n$  y  $a \in A$ , se define su **celda de Voronoi** como  $V(a) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - a\| \leq \|x - a'\| \forall a' \in A (a \neq a')\}$ . Una celda de Voronoi está formada por los puntos de  $\mathbb{R}^n$  que distan de  $a$  a lo sumo tanto como de cualquier otro punto de  $A$ . El conjunto

de todas las celdas de Voronoi de  $A$  cubre por completo  $\mathbb{R}^n$ .

Ahora bien, si  $A$  es un conjunto de Delone, las celdas de todos los puntos verifican lo siguiente: son convexas ( $n$ -polítopos), encajan dos a dos a lo largo de toda una cara  $n - 1$ -dimensional y no tienen en común puntos interiores. Por construcción a partir de la intersección de los bisectores se demuestra la primera y la segunda propiedad. La tercera se extrae directamente de la definición. Por lo tanto, el conjunto de todas las celdas de Voronoi de un conjunto de Delone tesela  $\mathbb{R}^n$ . De hecho, si  $A$  presenta FLC, habrá un número finito de ellas salvo traslación. Este es el caso cuando  $A = \mathcal{L}$  es un retículo de  $\mathbb{R}^n$ . Por la regularidad y periodicidad de los retículos,  $\mathcal{L}$  solo genera una celda de Voronoi salvo traslación. Además se cumple que  $V(a) = V + a$  con  $V = V(0)$ . Como curiosidad, los 5 posibles tipos de celdas de Voronoi de un retículo de  $\mathbb{R}^n$  son los paraleloedros de Fedorov (*Figura 3*); mientras que en  $\mathbb{R}^2$  solo hay 2: rectángulo, cuando  $\mathcal{L}$  tiene una base ortogonal; y hexágono en caso contrario.

A partir de ahora supongamos que  $A = \mathcal{L}$  es un retículo. Las celdas de Voronoi definen una jerarquía de caras o fronteras  $d$ -dimensionales ( $0 \leq d \leq n$ ). La propia celda se considera una cara. Se denota por  $\mathcal{V}$  al conjunto de todas las caras de las celdas de Voronoi, es decir,  $\mathcal{V} = \{\tau \subset V(x) \mid \tau \text{ es una } d\text{-cara de } V(x) \text{ para algún } x \in \mathcal{L}\}$ . El conjunto  $\mathcal{V}$  se denomina **complejo de Voronoi**. El conjunto dual de  $\mathcal{V}$  es el **complejo de Delone** y viene dado por  $\mathcal{V}^* = \{\tau^* \mid \tau \in \mathcal{V}\}$ , con

$$\tau^* = \text{conv}\{a \in \mathcal{L} \mid V(a) \text{ contiene a } \tau \text{ como una } d\text{-cara}\}$$

donde  $\text{conv}(\{a_i\}_{i \in I})$  es la envolvente convexa de  $\{a_i\}_{i \in I}$ . Por ejemplo, un punto  $a \in \mathcal{L}$  es el dual de  $V(a)$ , es decir,  $a \in \mathcal{V}^*$ . Además, los  $n$ -polítopos duales a un vértice de una celda  $V(x)$  se denominan **celdas de Delone**. De hecho, los centros de dichas celdas son los propios vértices duales.

En general, sea  $\tau^* = \text{conv}\{a_1, \dots, a_l\}$  un  $k$ -polítopo de  $\mathcal{V}^*$ , su dual será el polítopo que se encuentra en la intersección de los  $V(a_i)$ , es decir,  $\tau = \cap_{i=1}^l V(a_i)$ . A partir de ahí, se puede demostrar que la dimensión de  $\tau$  es  $n - k$  y por lo tanto tienen dimensiones complementarias. En la *Figura 13* se muestran el complejo de Voronoi y de Delone de un retículo triangular. Los cuadrados negros son los puntos del retículo, que son los vértices de las celdas de Delone. Los círculos blancos o negros son los vértices de las celdas de Voronoi, que a su vez son los centros de las celdas de Delone (y sus duales). El color permite diferenciar un vértice y su celda dual.

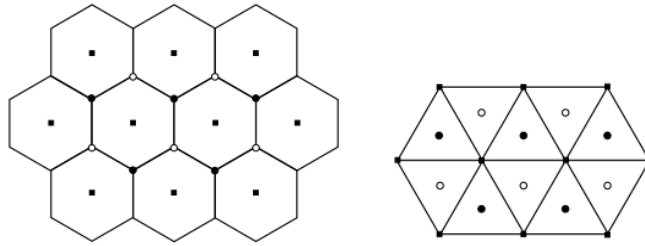


Figura 13: Complejo de Voronoi (izquierda) y de Delone (derecha) de un retículo triangular [6]

## Descripción del método

Una vez definidos los complejos de Voronoi y Delone, se procede a detallar la proyección. Dado un esquema C&P que verifica las hipótesis mencionadas al comienzo de esta sección, se denotan como  $\mathcal{V}$  y  $\mathcal{V}^*$  los complejos de Voronoi y Delone respectivamente. Los polítopos que componen la teselación  $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^d$  se extraen del complejo de Delone. La proyección de un polítopo  $\tau \in \mathcal{V}^*$ , de dimensión  $d$ , aparece en  $\mathcal{T}$  si su dual  $\tau^* \in \mathcal{V}$  interseca el espacio físico. Por lo tanto, la teselación  $\mathcal{T}$  se define como

$$\mathcal{T} = \{\pi(\tau) \mid \tau \in \mathcal{V}^*, \tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset \text{ y } \dim(\tau) = d\}$$

La teselación  $\mathcal{T}$  viene dada por las proyecciones de las  $d$ -caras de las celdas de Delone, cuyas  $(n - d)$ -caras duales del complejo de intersecan al espacio físico. Observar que los puntos del conjunto modelo que se obtendría también están incluidos en la teselación. La condición  $\tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$  se puede modificar partiendo de la hipótesis de que los espacios físico e interno son ortogonales. En este caso, se obtiene una ventana de aceptación muy sencilla de calcular. Primero veamos el caso en el que solo se proyectan los puntos del retículo y luego pasamos a la teselación completa.

Para que un punto  $a$  del retículo  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^n$  forme parte de la teselación (y del propio conjunto modelo que se genera), la condición  $\tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$  es equivalente a  $V(a) \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$ . Denotando  $V = V(0)$  y recordando que  $V(a) = V + a$ , se escoge  $W = \pi_{int}(V)$  y se tiene que

$$(\pi(a) \in \mathcal{T} \Leftrightarrow V(a) \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset) \Leftrightarrow \pi_{int}(a) \in W$$

La primera equivalencia es por la propia definición del método. La segunda se demuestra.

*Demostración.* Por una parte, sea  $a \in \mathcal{L}$ . Recordar que  $V(a) = V + a$ . Por la hipótesis  $\exists x \in V(a) \cap \mathbb{R}^d$ , es decir,  $x \in (V + a) \cap \mathbb{R}^d$ . Por lo tanto  $x - a \in V$  y como  $\pi_{int}(x) = 0$  ( $\mathbb{R}^d \perp \mathbb{R}^l$ ) se tiene que  $\pi_{int}(x - a) = \pi_{int}(-a) = -\pi_{int}(a) \in \pi_{int}(V)$ . Esto equivale a que  $\pi_{int}(a) \in -\pi_{int}(V) = \pi_{int}(-V) = \pi_{int}(V) = W$ , pues  $V = -V$  por ser  $\mathcal{L} = -\mathcal{L}$ .

Por la otra parte, sea  $a \in \mathcal{L}$  tal que  $\pi_{int}(a) \in \pi_{int}(V)$ . Esto significa que  $\exists y \in V$  tal que  $\pi_{int}(a) = \pi_{int}(y)$  y por tanto  $\exists z \in \ker(\pi_{int}) = \mathbb{R}^d$  con  $z = a - y$ . Como  $V = -V$ , se tiene que  $-y \in V$  y  $z \in V + a = V(a)$ .  $\square$

Por tanto, si se escoge  $W = \pi_{int}(V)$ , la condición para que  $\pi(a) \in \mathcal{T}$  equivale a  $\pi_{int}(a) \in W$ , análogo a los conjuntos modelo. Como  $W$  es relativamente compacto, con interior no vacío, los puntos de la teselación  $\mathcal{T}$  son un conjunto modelo aperiódico.

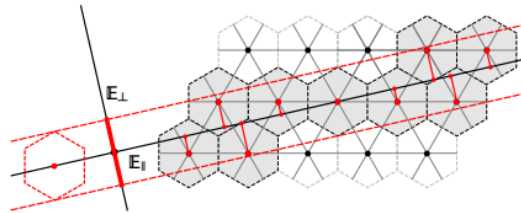


Figura 14: Representación gráfica del proceso de proyección de los puntos del retículo triangular [31]

De forma análoga a los puntos de  $\mathcal{L}$ , la condición  $\tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$  para que  $\pi(\tau) \in \mathcal{T}$  se puede caracterizar a través de la ventana  $W = \pi_{int}(V)$ . Para ello, como  $V(a)$  viene determinado por  $V$ , las  $d$ -caras de las celdas de Delone  $\tau \in \mathcal{V}^*$  vienen caracterizadas por las que son adyacentes al origen. Es decir, dada  $\tau \in \mathcal{V}^*$ , existe  $a \in \tau$ , ( $a \in \mathcal{L}$ ), tal que  $\tau = \tilde{\tau} + a$ , siendo  $\tilde{\tau} \in \mathcal{V}^*$  adyacente al origen. Ahora bien,  $\tau^* = (\tilde{\tau} + a)^* = \cap_{b \in (\tilde{\tau} + a)} V(b) = \cap_{b - a \in \tilde{\tau}} V(b) = \cap_{c \in \tilde{\tau}} V(a + c) = \cap_{c \in \tilde{\tau}} (a + V(c)) = \tilde{\tau}^* + a$  por la definición de la dualidad. Observar que  $\tilde{\tau}^*$  son las  $n - d$ -caras de la celda de Voronoi  $V$ . Por lo tanto  $\tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$  es equivalente a  $(\tilde{\tau}^* + a) \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset$ , es decir

$$(\pi(\tau) \in \mathcal{T} \Leftrightarrow \tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset) \Leftrightarrow \pi_{int}(a) \in W \text{ con } \tau = \tilde{\tau} + a$$

La demostración es análoga a la anterior. Como  $\tau^* \cap \mathbb{R}^d \neq \emptyset \Leftrightarrow \exists x \in \mathbb{R}^d$  tal que  $x \in \tilde{\tau}^* + a$ , se tiene que  $\pi_{int}(a) \in -\pi_{int}(\tilde{\tau}^*) = \pi_{int}(-\tilde{\tau}^*) \subset W$ . De hecho, los conjuntos  $\omega_{\tilde{\tau}^*} = \pi_{int}(-\tilde{\tau}^*) \subset W$  son las **regiones de la ventana  $W$**  de las  $(n - d)$ -caras de la celda de Voronoi  $V$ . Cada región  $\omega_{\tilde{\tau}^*}$  está asociada a la  $d$ -cara  $\tilde{\tau}$ , es decir, se pueden considerar como subventanas de aceptación de un tipo específico de figura en la teselación. Para una región  $\omega_{\tilde{\tau}^*}$ , si  $a \in \mathcal{L}$  con  $\pi_{int}(a) \in \omega_{\tilde{\tau}^*}$ , se tiene que  $\pi(\tilde{\tau} + a) \in \mathcal{T}$ . En la *Figura 15* se muestra una representación gráfica del proceso. Para evitar los casos degenerados, se toman las regiones  $\omega_{\tilde{\tau}^*}$  con dimensión  $n - d$ .

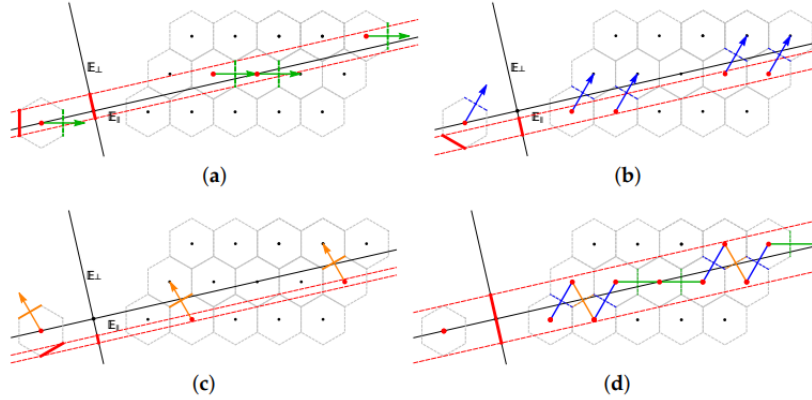


Figura 15: Regiones de ventana de aceptación para tres tipos de  $d$ -caras diferentes (a,b y c) y la unión de todas las que serán proyectadas (d)

[31]

Por último, dado  $a \in \mathcal{L}$  tal que  $\pi(a) \in \mathcal{T}$ , se define su **configuración de vértice**  $C(a)$  como el conjunto de figuras o polítopos adyacentes a él, es decir,  $C(a) = \{\pi(\tau) \in \mathcal{T} \mid a \in \tau\}$ . Por lo visto anteriormente, esto equivale a  $C(a) = \{\pi(\tilde{\tau} + a) \mid \pi_{int}(a) \in \omega_{\tilde{\tau}^*}\}$ . La intersección de las regiones  $\omega_{\tilde{\tau}^*}$  que contienen a  $\pi_{int}(a)$  se denomina **sector de  $a$** . Se denota por  $S(a)$ . Cualquier otro punto  $a' \in \mathcal{L}$  cuya  $\pi_{int}(a') \in S(a)$  verifica que  $C(a) = C(a')$ , pues por definición, ambos son adyacentes al mismo tipo de figuras. Por lo tanto, como existen finitas posibles intersecciones diferentes, existe un número finito de configuraciones de vértices. Además, como  $vol(S(a))/vol(W)$  mide la probabilidad de que  $\pi_{int}(a') \in S(a)$ , la frecuencia de aparición de la configuración del vértice  $a$  es  $F(C(a)) = \frac{vol(S(a))}{vol(W)}$ .

## Ejemplos

A partir de este método se pueden obtener teselaciones aperiódicas con simetrías  $k$ -rotacionales propias de los cuasicristales. Algunos ejemplos parten del retículo  $\mathbb{Z}^n$ , mientras que otros utilizan

los retículos raíces [33]. En este caso, se estudia su grupo puntual (conjunto de isometrías que lo dejan fijo) y se buscan subgrupos que presenten las simetrías  $k$ -rotacionales, como por ejemplo  $C_k$ . Dichos subgrupos dejan invariantes subespacios de  $\mathbb{R}^n$ , tratando que sean bidimensionales. Así se consigue el esquema C&P y se ejecuta el proceso de las proyecciones de las caras de Voronoi y de Delone. El artículo [34] explica con sumo detalle el caso en el que  $k = 8, 12$ , partiendo del retículo  $D_4$  y [35] hace lo propio para  $k = 5$  y el retículo  $A_4$ . En ambos se estudian dos de las teselaciones más conocidas: la de Ammann-Beenker ( $k = 8$ , *Figura 12*) y una de Penrose ( $k = 5$ , *Figura 16*).

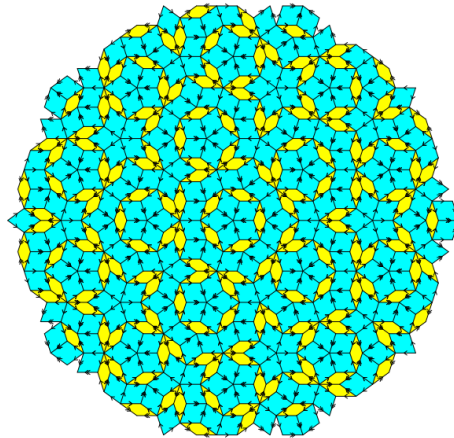


Figura 16: Teselación aperiódica de Penrose, con simetría 5-rotacional  
[6]

## 4.2. Reglas de coincidencia

Este método consiste en una serie de reglas que deben cumplir las figuras poligonales para teselar todo el plano de forma aperiódica. En los casos más sencillos, estas reglas pueden ser marcas visuales tanto en las aristas como en el interior de las figuras, tales que solo se pueden unir si “conectan”. Están permitidas las rotaciones y reflexiones de las componentes. La primera teselación aperiódica, confeccionada por Raphael Robinson en 1971 [30], está basada en este método. Son 6 cuadrados con marcas en su interior que teselan el plano únicamente de forma aperiódica. Un argumento informal para ver la aperiodicidad es que una disposición legal de las figuras origina cuadrados entrelazados cuyos tamaños se duplican. Ver la *Figura 17*.

Otro ejemplo, quizás el más conocido, son las teselaciones de Penrose [36]. Estas al principio estaban compuestas por 6 figuras, pero redujo el número a 2. Las formas de las figuras de Penrose pueden variar, aunque las más famosas son las kites & darts (en español cometas y dardos). En la *Figura 18* se muestra la versión de John Conway, cuya regla se basa en unir curvas del mismo color. La versión inicial de kites & darts es menos visual, simplemente definiendo dos tipos de vértices (T y H) que se pueden unir con los del otro tipo. La teselación de la (*Figura 16*) es otra teselación aperiódica de Penrose, cuyos polígonos básicos son de nuevo dos figuras rómbicas (colores amarillo y azul) con diferentes marcas (flechas simples y dobles) en sus aristas. De hecho, el propio Penrose demostró en [37] que muchas de sus teselaciones eran localmente indistinguibles. Esto significa que no es posible diferenciarlas mirando un conglomerado. En el *Capítulo 6* de [2] se muestra el paso de las kites & darts a la teselación de la *Figura 16*, así como muchas otras propiedades de las tse-

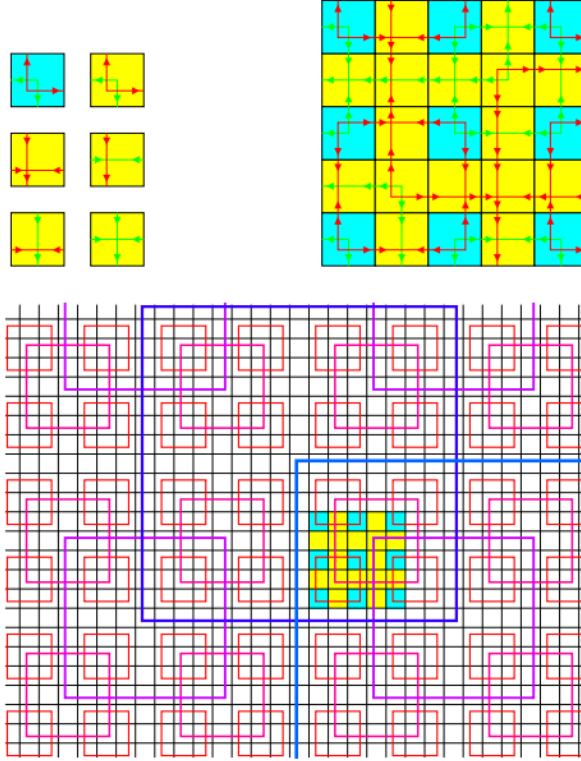


Figura 17: Teselación aperiódica de Raphael Robinson  
[24]

laciones de Penrose.

Observar que si se ignoran las marcas, los polígonos de los ejemplos mostrados pueden teselar el plano de forma periódica. Además, las reglas de coincidencia no originan un algoritmo tal que siguiéndolo se llega necesariamente a una teselación aperiódica. Es posible encontrarse en una situación en la que ninguna figura encaja en un sitio particular. Por lo tanto, este método se suele comparar con un puzzle que requiere una gran creatividad. A menudo está ligado al método de la inflación, ya sea por decoración o para obtener la aperiodicidad buscada.

### 4.3. Inflación

Este método está compuesto por dos pasos. El primero consiste en reescalar la teselación por un factor constante (factor de inflación), mientras que el segundo se basa en dividir la teselación en copias de las figuras originales. La combinación de los dos pasos origina un método con el que se pueden conseguir teselaciones aperiódicas.

Existe un método de inflación para el ejemplo de la teselación de Ammann-Beenker de la *Figura 12*. El factor de inflación es el  $\Delta_S$  ya presentado y las reglas de inflación se muestran en la *Figura 19*. Observar que la disección del triángulo quiebra la simetría de reflexión. Para conocer la orientación del triángulo se introduce una flecha roja en la hipotenusa. Según dicha orientación, aplicar la inflación que aparece en la figura o su reflejada. Además, las figuras rotadas o reflejadas experimentan

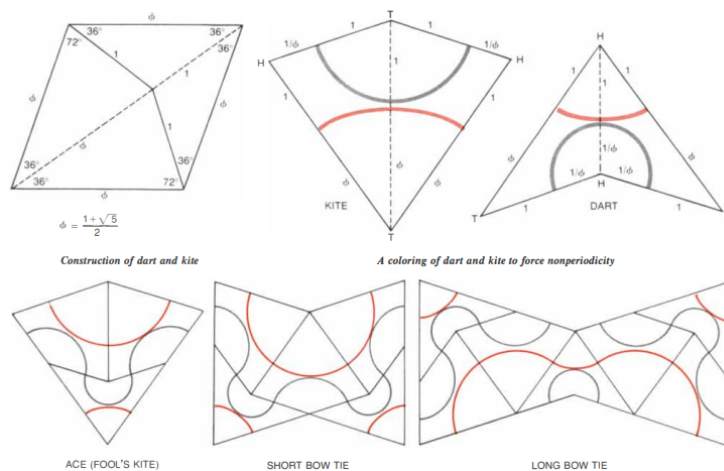


Figura 18: Kits & Darts de Roger Penrose y John Horton Conway [32]

la regla de inflación rotada o reflejada. Como el rombo no rompe la simetría, el resto de flechas y marcas son de carácter decorativo. Sin embargo, forman un conjunto de reglas de coincidencia, pues aplicando el método de inflación todas acaban conectando.

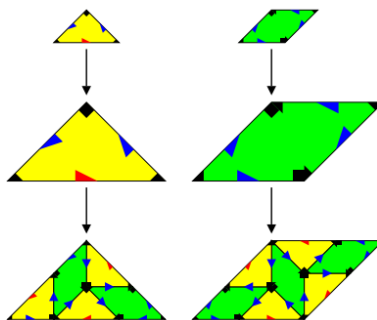


Figura 19: Reglas de inflación para obtener la teselación de Ammann-Beenker [6]

Comenzando con dos triángulos de misma orientación que forman un cuadrado y aplicando repetidamente estas reglas de inflación, se puede construir la teselación de Ammann-Beenker. Observar que el cuadrado inicial queda fijado al aplicar un número par de inflaciones. Por lo tanto, cualquier paso intermedio de la teselación final se puede ver como un punto fijo de alguna potencia de las reglas de inflación. De hecho, por el mismo motivo, esta teselación es repetitiva.



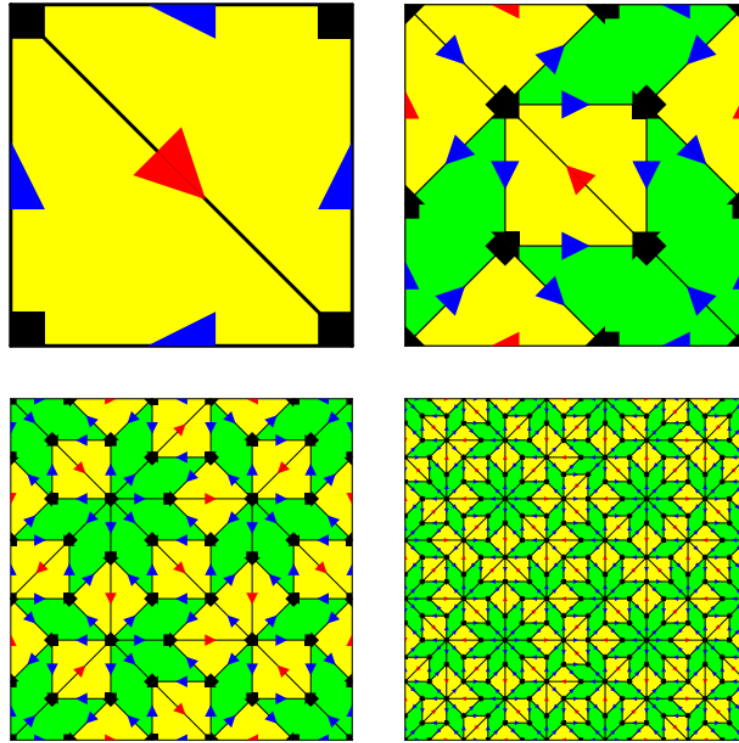


Figura 20: Proceso de inflación para obtener la teselación de Ammann-Beenker [24]

## Bibliografía

- [1] Dan Shechtman y col. “Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry”. En: *Physical review letters* 53.20 (1984).
- [2] Marjorie Senechal. *Quasicrystals and geometry*. CUP Archive, 1996.
- [3] René Just Haüy. *Traité de cristallographie: suivi d’une application des principes de cette science à la détermination des espèces minérales, et d’une nouvelle méthode pour mettre les formes cristallines en projection*. Vol. 1. Bachelier et Huzard, 1822.
- [4] Auguste Bravais. “Les Systemes Formes par des Points Distribues Regulierement sur un Plan ou Dans L’espace”. En: *Journal de l’Ecole Polytechnique, XIX* 1 (1850).
- [5] E Feodoroff. “Symmetry of regular systems of figures”. En: *Russ J. Crystallogr. Mineral* 21 (1885).
- [6] Uwe Grimm y Peter Kramer. “Quasicrystals”. En: *arXiv preprint arXiv:1906.10392* (2019).
- [7] Michael Baake y Uwe Grimm. *Aperiodic order*. Vol. 1. Cambridge University Press, 2013.
- [8] International Union of Crystallography. *IUCR*. [En línea] Disponible en: <https://www.iucr.org/>.
- [9] Jeffrey C Lagarias. “Geometric models for quasicrystals I. Delone sets of finite type”. En: *Discrete & Computational Geometry* 21.2 (1999), págs. 161-191.
- [10] Jeffrey C Lagarias. “Meyer’s concept of quasicrystal and quasiregular sets”. En: *Communications in mathematical physics* 179.2 (1996), págs. 365-376.
- [11] Nicolae Strungaru. “Almost periodic measures and long-range order in Meyer sets”. En: *Discrete & Computational Geometry* 33.3 (2005), págs. 483-505.
- [12] Yves Meyer. “Quasicrystals, Diophantine approximation and algebraic numbers”. En: *Beyond quasicrystals*. Springer, 1995, págs. 3-16.
- [13] Johannes Kellendonk y Lorenzo Sadun. “Meyer sets, topological eigenvalues, and Cantor fiber bundles”. En: *Journal of the London Mathematical Society* 89.1 (2014), págs. 114-130.
- [14] Jeffrey C Lagarias. “Mathematical quasicrystals and the problem of diffraction”. En: *Directions in mathematical quasicrystals* 13 (2000), págs. 61-93.
- [15] Bernd Souvignier. “Group theory applied to crystallography”. En: *preprint* (2008).
- [16] Ron Lifshitz. “Quasicrystals: A matter of definition”. En: *Foundations of Physics* 33.12 (2003), págs. 1703-1711.
- [17] Robert V Moody. “Model sets: A survey”. En: *From quasicrystals to more complex systems*. Springer, 2000, págs. 145-166.
- [18] Tsutomu Ishimasa. “Dodecagonal quasicrystals still in progress”. En: *Israel Journal of Chemistry* 51.11-12 (2011), págs. 1216-1225.
- [19] Michael Baake, Robert V Moody y Martin Schlottmann. “Limit-(quasi) periodic point sets as quasicrystals with p-adic internal spaces”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 31.27 (1998), pág. 5755.
- [20] Martin Schlottmann. “Cut-and-project sets in locally compact Abelian groups”. En: *Quasicrystals and discrete geometry* 10 (1998), págs. 247-264.
- [21] Martin Schlottmann. “Generalized model sets and dynamical systems”. En: *CRM Monograph Series*. Citeseer. 1999.

- [22] Yves Meyer. *Algebraic numbers and harmonic analysis*. Elsevier, 2000.
- [23] Edita Pelantová y Zuzana Masáková. “Quasicrystals: algebraic, combinatorial and geometrical aspects”. En: *arXiv preprint math-ph/0603065* (2006).
- [24] Michael Baake, Uwe Grimm y Robert V Moody. “What is aperiodic order?” En: *arXiv preprint math/0203252* (2002).
- [25] John E Hutchinson. “Fractals and self similarity”. En: *Indiana University Mathematics Journal* 30.5 (1981), págs. 713-747.
- [26] Ian Stewart. *Galois theory*. Chapman y Hall/CRC, 1990.
- [27] Michael Baake y col. “Discrete tomography of planar model sets”. En: *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography* 62.6 (2006), págs. 419-433.
- [28] Lawrence C Washington. *Introduction to cyclotomic fields*. Vol. 83. Springer Science & Business Media, 1997.
- [29] Zenon Ivanovich Borevich e Igor Rostislavovich Shafarevich. *Number theory*. Academic press, 1986.
- [30] Raphael M Robinson. “Undecidability and nonperiodicity for tilings of the plane”. En: *Inventiones mathematicae* 12.3 (1971), págs. 177-209.
- [31] Dugan Hammock, Fang Fang y Klee Irwin. “Quasicrystal tilings in three dimensions and their empires”. En: *Crystals* 8.10 (2018).
- [32] Martin Gardner. “Extraordinary nonperiodic tiling that enriches the theory of tiles”. En: *Scientific American* 236.1 (1977), págs. 110-121.
- [33] Peter Engel, Louis Michel y Marjorie Sénéchal. *Lattice geometry*. Inf. téc. 2004.
- [34] M Baake, D Joseph y M Schlottmann. “The root lattice  $D_4$  and planar quasilattices with octagonal and dodecagonal symmetry”. En: *International Journal of Modern Physics B* 5.11 (1991), págs. 1927-1953.
- [35] Michael Baake y col. “Planar patterns with fivefold symmetry as sections of periodic structures in 4-space”. En: *International Journal of Modern Physics B* 4.15n16 (1990), págs. 2217-2268.
- [36] Martin Gardner. *Penrose tiles to trapdoor ciphers: And the return of Dr Matrix*. Cambridge University Press, 1997.
- [37] Roger Penrose. “The role of aesthetics in pure and applied mathematical research”. En: *Bull. Inst. Math. Appl.* 10 (1974), págs. 266-271.