

Cuasicristales

Carlos Amador Bedolla*

ABSTRACT (Quasicrystals)

The Nobel Prize in Chemistry for 2011 was awarded to Daniel Schechtman for his discovery of nonperiodic long-range ordered atomic structures or quasicrystals. Because this discovery changed the paradigm on the requisites for the existence of a discrete diffraction pattern, its original acceptance was not straightforward; but the combination of thorough experimental evidence with previous mathematical developments forced the general acknowledgement of these facts. Recent discoveries of quasicrystalline structures in minerals have extended the fame of the concept.

KEYWORDS: Nobel Prize 2011, quasicrystals, Penrose tilings

Con cierta frecuencia la materia se acomoda de forma tal que se producen estructuras ordenadas. Algunos materiales macroscópicos que han soportado el paso del ingente tiempo geológico, adoptan formas que solamente pueden entenderse con base en el ordenamiento de sus unidades constituyentes: piénsese, por ejemplo, en una muestra de amatista o, más de acuerdo con su fama, en el diamante. En el desarrollo de la química se planteó la pregunta sobre el tamaño de la unidad constituyente de la materia —el tamaño de esas cajas que repetidas numerosas veces constituyen un cristal—, y no fue sino en tiempos relativamente modernos que pudimos aceptar la idea de que ese tamaño es inimaginablemente pequeño, y concluir, por tanto, que en un diamante de un kilate hay más de 10^{23} cajas pulcramente acomodadas.

Los cristales *perfectos* más grandes, que se cocieron a fuego lentísimo, están hechos de unidades más bien pequeñas; moléculas o iones de pocos átomos —uno, como en el caso del diamante, dos, como en la sal, tres, como en la amatista, trece, como en la amazonita— pero también es posible que las “cajas” que se acomodan pulcramente en un cristal sean mucho más grandes, de miles o cientos de miles de átomos, como en el caso de las proteínas cristalinas. Lo cierto es que, en los cristales, esas “cajas” se acomodan y provocan que filas y filas de átomos terminen a su vez pulcramente ordenadas. Y la existencia de filas y filas de átomos ordenados es fundamental para el conocimiento de la estructura de la materia porque en esos átomos la luz se refleja y, en ciertos ángulos, los reflejos de las filas y filas de átomos pueden interferir constructivamente para producir una fuerte señal luminosa, en ese fenómeno

que conocemos como difracción. En 1912, Max von Laue pudo medir por primera vez la difracción en un cristal y encontró que los ángulos en los que el reflejo se refuerza —es decir, el ordenamiento de las filas y filas de átomos— correspondía al pulcro ordenamiento de “cajas” de forma cúbica.

Como siempre, esta técnica de difracción de rayos X —las filas de átomos se acomodan separadas por distancias de unos pocos angstroms, o sea que la luz cuyos reflejos pueden reforzarse debe tener longitudes de onda de unos pocos angstroms también, o sea, deben ser rayos X— provocó dos líneas de investigación: la de científicos experimentales buscando qué otras formas de cajas aparecían en otros cristales y la de teóricos especulando qué formas de cajas podían existir. Como tantas veces, la búsqueda experimental concordó con la búsqueda teórica y se estableció el acuerdo —eso que también llamamos conocimiento— científico de que sólo hay siete formas de cajas posibles —los siete sistemas cristalinos— que se pueden llenar de catorce formas —las catorce redes de Bravais. El acuerdo implica una de dos posibilidades: o el material está acomodado en uno de los siete sistemas cristalinos o no presenta un patrón de difracción. Los teóricos pudieron explicar este resultado de manera muy convincente ya que es más o menos fácil de ver que sólo las cajas trigonales, cúbicas, hexagonales, tetragonales, ortorrómbicas, triclinicas y monoclinicas pueden acomodarse repetidamente para llenar el espacio. Y estas cajas tienen simetría de rotación de una, dos, tres, cuatro y seis fracciones del círculo completo — C_1 , C_2 , C_3 , C_4 y C_6 como se dice técnicamente—, no más.

Pero en 1982, Daniel Schechtman, un profesor israelí, de sabático en Baltimore, encontró que el análisis de difracción de cierto sólido correspondía a una repetición con simetría quintuple. El paradigma presente era tan poderoso y la teoría tan sólida en eso de que no hay cajas con simetría quintuple que llenen el espacio, que su hallazgo no fue muy bien recibido. El rumor —confirmado recientemente por el propio Schechtman en una entrevista post Nobel, encantadora por su candor, que se puede ver en su página oficial (Schechtman,

* Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Avenida Universidad 3000, 04510 México, Distrito Federal, México.

Correo electrónico: carlos.amador@unam.mx

2011)— dice que su asesor lo despidió del grupo de investigación por haberlos avergonzado con la interpretación de que una simetría quintuple era posible en un sólido. De hecho, la publicación tuvo que vencer un rechazo inicial y agrupar un *dream team* de coautores antes de aparecer en el prestigiado *Physical Review Letters*, dos años después del hallazgo inicial (Schechtman *et al.*, 1984). Desde luego, el hallazgo de Schechtman hacía necesaria una reinterpretación de la comprensión del fenómeno de difracción que permitiera reintegrar nuestros sólidos conocimientos anteriores con la evidencia reciente.

Los matemáticos ya habían avanzado en esa dirección. Y su avance, aparte de contribuir a reintegrar evidencia e interpretación en el caso de la difracción de rayos X, nos ayuda ahora a comprender el problema; en parte gracias a que es más fácil para las matemáticas trabajar en dos dimensiones donde el problema es menos complejo. El equivalente, en dos dimensiones, a nuestro problema de los cristales es el de cubrir periódicamente un plano o, dicho técnicamente, el problema de la *teselación* del plano y, dicho para pronto, el problema de qué forma deben tener las losetas idénticas que sí pueden cubrir un cuarto de baño. Ya sabemos que los ladrillos —rectangulares— pueden, también los triángulos, los cuadrados y los hexágonos, o sea las mismas simetrías de rotación — C_2 , C_3 , C_4 y C_6 — que en el caso tridimensional; y nadie más. En dos dimensiones es más fácil ver cuál es el problema: cualquier loseta que no tenga esa simetría dejará huecos sin cubrir en el plano, y si se pretende cubrir esos huecos hay que usar losetas diferentes. Pero en 1974, el físico-matemático inglés Roger Penrose (Penrose, 1978) descubrió la posibilidad de cubrir el plano con dos losetas que combinadas producen ordenamiento pentagonal —como el que se muestra en las patrones islámicos en el editorial de este número (Garritz, 2012)— a costa de que el ordenamiento, si bien de largo alcance, es aperiódico. Ahora hay que atender a la sutil diferencia matemática entre orden a largo alcance y periodicidad. La periodicidad sólo está perfectamente definida en algo infinito: cualquier fracción del total se reproduce idénticamente en alguna otra parte del total, mientras que en el ordenamiento a largo alcance pero aperiódico no hay garantía de que cualquier fracción del total se reproduzca en otro lugar. Y aquí es cuando las matemáticas difieren de la química, ya que si bien nuestros materiales contienen un número enorme de partículas, el número es siempre finito. Y entonces puede no importar que una fracción del total —infinito— no se repita ya que, mientras sea ordenado, puede producir la interferencia constructiva entre las ondas reflejadas por los átomos que causan la difracción. Las teselaciones de Penrose, como los cristales de Schechtman, no son periódicas, pero exhiben orden a largo alcance. Previsiblemente, se llegó al acuerdo de llamarlas cuasiperiódicas.

Así, el “cristal” de Schechtman pudo ser interpretado como una realización en tres dimensiones del problema matemáti-

co de la teselación: existen arreglos ordenados de átomos, no periódicos pero sí de largo alcance, y por lo tanto capaces de producir difracción de rayos X a pesar de su simetría quintuple. Y para acabar de reconciliar nuestros conocimientos, se sugirió denominar a este tipo de sólidos *cuasicristales*. La oposición a esta interpretación duró aún algún tiempo. El mismo Linus Pauling, se dice, comentó que “no existen los cuasicristales, lo que existen son los cuasicientíficos”. Sin embargo, la acumulación de evidencia de la existencia de sólidos con simetría quintuple detectada por rayos X ganó progresivamente el reconocimiento de la validez del hallazgo. El descubrimiento de un sólido cuasicristalino natural en un mineral en Rusia hace dos años (Bindi *et al.*, 2009, 2011) contribuyó aún más al prestigio del descubrimiento que, sin duda, ha quedado asentado definitivamente con la distinción del Premio Nobel de Química de este año. Siempre hay razones para discutir y se especula sobre si los miembros del Comité Nobel consideraron la posibilidad de incluir a Roger Penrose en la recepción del premio, y sobre si, en ese caso, hubo rechazo a incluir a un matemático entre los ganadores del premio de Química. Pero, como debe ser, éstas son sólo especulaciones infundadas.

Este premio se distingue además por otras dos razones. La primera es la relativa antigüedad del hallazgo, toda vez que han pasado casi treinta años desde su descubrimiento. La otra, la característica principalmente de ciencia básica de este hallazgo, que modificó un paradigma fundamental de la ciencia cristalográfica pero que ha encontrado relativamente pocas aplicaciones tecnológicas. Esto, que no es novedoso entre los premios Nobel de Química, provoca, sin embargo, preguntas entre los periodistas que reportan sobre el evento. El propio Schechtman, en la entrevista mencionada, asegura que existen posibilidades de que su hallazgo resulte en ciertas aplicaciones dado que estos materiales presentan poca adhesión, gran resistencia a la oxidación y propiedades singulares a altas temperaturas.

Referencias

- Bindi, L., Steinhardt, P. J., Yao, N. & Lu, P. J., Natural quasicrystals, *Science*, **324**, 1306-1309, 2009.
- Bindi, L., Steinhardt, P. J., Yao, N. & Lu, P. J. Icosahedrite, $Al_{63}Cu_{24}Fe_{13}$, the first natural quasicrystal, *American Mineralogist*, **96**, 928-931, 2011.
- Garritz, A., Quasicristales y arte islámico, *Educ. quím.*, **23**(1), 2-5, 2012.
- Penrose, R., Pentaplexity: A class of non-periodic tilings of the plane, *The Mathematical Intelligencer*, **2**, 32-37, 1978.
- Schechtman, D., Blech, I., Gratias, D., Cahn, J. W., Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry, *Physical Review Letters*, **53**(20), 1951-1953, 1984.
- Schechtman, D., en la URL <http://materials.technion.ac.il/st/> (accesada en noviembre 7, 2011).