

CUASI ZONAS DE BRILLOUIN EN Al-Pd-Mn

R. López Planes^{1,2}, J. Córdoba¹ y V. González M.²

¹Departamento de Física, Escuela de Ciencias, Núcleo de Sucre, Universidad de Oriente

²Instituto de Investigaciones en Biomedicina y Ciencias Aplicadas de la Universidad de Oriente, Cumaná, 6101, Venezuela, A.P. 245

ralopez@sucre.udo.edu.ve

Resumen

Los cuasicristales son una forma de agregación de la materia, que de acuerdo al ordenamiento de sus átomos, se encuentran entre los sólidos y los amorfos, no tienen periodicidad pero cuentan con un orden a largo alcance obedeciendo su estructura a una regla matemática conocida como sucesión de Fibonacci. A diferencia de los cristales, las zonas de Brillouin dependen, en estos materiales, del punto de referencia que se considere en el patrón de difracción, razón por lo cual se denominan cuasi zonas. En este trabajo determinamos las cuasizonas de Brillouin en la aleación cuasicristalina Al-Pd-Mn.

Descriptores: Cuasicristales, Brillouin, Al-Pd-Mn

Summary

The quasicrystals are a form of aggregation of the matter, which in agreement to the atoms classification find between the solid and amorphous structures, do not have periodicity, but they possess large order obeying to a mathematical rule known as Fibonacci's succession. Unlike the crystals, Brillouin's zones depend, in these materials, on the point of reference that is considered in the diffraction pattern, reason by which they are named cuasi zones. In this work we determine Brillouin's quasizonas in the Al-Pd-Mn quasicrystalline alloy.

Uno de los grandes desarrollos en la física del estado sólido, en las últimas décadas, ha sido el descubrimiento de los cuasicristales por Shechtman *et al* (1984). Estos compuestos son una nueva forma de agregación de la materia, que de acuerdo al ordenamiento de sus átomos, se encuentran entre los cristales y los amorfos, no tienen periodicidad pero cuentan con una ordenación a largo alcance, obedeciendo su estructura a una regla matemática conocida como sucesión de Fibonacci. A diferencia de los cristales, las zonas de Brillouin en los cuasicristales dependen del punto de referencia que se considere en el patrón de difracción razón por la cual se denominan cuasizonas de Brillouin, una vez establecida la cuasizona a estudiar, se pueden explicar y entender mejor las propiedades de transporte en los cuasicristales, así como determinar las bandas de energía propias. En este trabajo determinamos diferentes cuasizonas de Brillouin para la aleación cuasicristalina Al-Pd-Mn.

Para describir un cristal clásico en el espacio recíproco, el vector del espacio recíproco puede ser escrito como $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$: donde h, k y l son los índices de Miller y los vectores \vec{A} , \vec{B} y \vec{C} son vectores base de la red recíproca. En los cuasicristales el número de vectores base independientes de la red recíproca sobrepasan las dimensiones espaciales, por lo tanto; es necesario describir la estructura en un espacio con un número mayor de dimensiones, el hiperespacio. Para describir la simetría icosaedrica es obligatorio un espacio de seis dimensiones (6D), el vector de la red recíproca para este espacio puede ser escrito como $\vec{G} = (h + h'\tau)\vec{A} + (k + k'\tau)\vec{B} + (l + l'\tau)\vec{C}$, donde τ es el número de oro o media dorada ($\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$). La estructura puede ser descrita en el mismo sentido que los cristales clásicos pero con 6 índices de Miller (h,h',k,k',l,l').

En los cuasicristales, el número de vectores base independientes de la red recíproca excede las dimensiones espaciales, por lo tanto es necesario describir la estructura en un espacio con un número mayor de dimensiones, el hiperespacio. Para describir la simetría icosaedrales es necesario un espacio 6D, (Rodmar et al, 2000) el vector de la red recíproca para este espacio puede ser escrito como $\mathbf{G} = \sum_{i=1}^6 n_i \mathbf{d}_i$, donde n_i son enteros, \mathbf{a}_i son los 6 vectores bases que definen el hiperespacio 6D y vienen dado por $\mathbf{d}_1 = (1, \tau, 0)$, $\mathbf{d}_2 = (-1, \tau, 0)$, $\mathbf{d}_3 = (0, 1, \tau)$, $\mathbf{d}_4 = (0, -1, \tau)$, $\mathbf{d}_5 = (\tau, 0, 1)$, $\mathbf{d}_6 = (\tau, 0, -1)$ y τ el número de oro o media dorada ($\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$), (Hiramoto y Kohmoto, 1992). Esta simetría icosaedrales puede observarse en la figura 1, donde se esquematizan claramente los vectores de la red.

La estructura puede ser descrita en el mismo sentido que los cristales clásicos pero con seis índices de Miller ($n_i, i= 1 \dots 6$), es decir; para que exista difracción de debe cumplir la condición de Bragg que se puede expresar como: $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$, al igual que en los cristales y considerando la condición de Bragg, existe una primera zona de Brillouin para los cuasicristales, solo que en estos, dicha zona no es única, sino que depende de donde localicemos nuestro sistema de referencia, esto se debe a la cuasiperiodicidad que exhiben los átomos en la red cuasicristalina.

El concepto de zona de Brillouin es difícil de concebir en una simetría icosaedrales debido a la aperiodicidad de los cuasicristales. Sin embargo se pueden construir zonas a partir de los picos fuertes de Bragg en el patrón de difracción, como se observa en la figura 2.

Así como lo son las redes de Bravais en dos dimensiones para los cristales, lo es el patrón de Penrose (1979) para los cuasicristales, y haciendo similitud entre estas se pueden obtener valores para los vectores de la red recíproca y las perpendiculares que

los bisectan que forman a su vez las cuasizonas de Brillouin, lo cual infiere que los límites para estas cuasizonas están en el orden de $0,63 \text{ \AA}^{-1}$ y $1,06 \text{ \AA}^{-1}$.

La característica más importante del patrón de Penrose es que los resultados de experimentos de difracción óptica realizados con él coinciden cualitativamente con los de microscopía electrónica hechos en cuasicristales reales, aunque no en detalle, evidenciando que ambos poseen el mismo tipo de orden. El orden traslacional de largo alcance en un patrón de Penrose deriva de la existencia de un conjunto estricto de reglas que deben seguirse al añadir nuevas piezas al patrón que fuerzan el orden cuasiperiódico. El orden orientacional, también producto de esta ley, se hace evidente notando que las aristas de los rombos que la componen son paralelas a direcciones relacionadas por una rotación de $360/5$ grados.

Jenks et al (2002) usando difracción electrónica de baja energía (LEED) encontraron que la distancia entre los vecinos más cercanos para la fase icosaedra del Al-Pd-Mn está entre $2,96 \text{ \AA}$ y $4,97 \text{ \AA}$.

Este rango de valores reportados por Jenks et al (2002) se debe que a diferencia de los cristales convencionales en los que las posiciones atómicas se determinan mediante difracción de rayos x, en los cuasicristales no es posible obtener un valor único de parámetro de red, la razón es que mientras en un cristal las celdas unitarias están decoradas idénticamente y sólo hay una manera de acomodarlas, en un patrón de Penrose existen un número infinito de diferentes maneras no equivalentes de arreglar los romboedros, como es el caso de la figura 3 que muestra un patrón de Penrose, no único, para el Al-Pd-Mn. Aunque se han desarrollado sofisticadas técnicas basadas en el análisis de la información de difracción de neutrones en espacios de 6D, éstas no son confiables, pues están plagadas

de errores y normalmente presuponen un arreglo específico de los romboedros, es decir, proporcionan una respuesta anticipada al problema que quieren resolver.

Por esta razón, casi todo el trabajo teórico encaminado a determinar las posiciones que ocupan los átomos en el cuasicristal, ha involucrado procesos de simulación que consisten en la generación de un modelo atómico que el investigador construye ad-hoc, decorando con átomos algún arreglo específico de romboedros escogido convenientemente, normalmente el más sencillo. Después se hacen cálculos sobre las diversas propiedades que tendría el modelo como si existiera realmente y se compara con resultados experimentales. Todo este hecho evidencia que hablar de una cuasizona de Brillouin, no puede plantearse como una realidad, y como observamos en la figura 2 existen diferentes cuasizonas de Brillouin, no solo por el punto de referencia que se considere en la cuasiestructura, sino también en función del patrón de Penrose que se considere.

Como resultado, la literatura científica está llena de diferentes modelos atómicos que intentan reproducir la estructura atómica de aleaciones particulares generadas en condiciones específicas. En la mayoría de los casos, la insistencia en decorar estructuras afines al patrón de Penrose, generando estructuras que si bien simulan las propiedades de orden de los cuasicristales, son poco realistas en el sentido de que si se les aplicaran las fuerzas de atracción y repulsión entre átomos que existirían en si el modelo fuese real, éstos se colapsarían.

Referencias

C.J. Jenks, A.R. Ross, T.A. Lograsso, J.A. Whaley and R. Bastasz (2002) Angle-resolved low-energy ion scattering studies of quasicrystalline Al-Pd-Mn. Surf. Scin. **521**, 34-42.

H. Hiramoto and M. Kohmoto (1992) Electronic Spectral and Wavefunction Properties of One-Dimensional Quasiperiodic Systems: a Scaling Approach. *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 281-320.

R. Penrose (1979) Global General Relativity. *Proc. R. Soc. Lond. A* **368**, 19 – 21.

M. Rodmar, M. Ahlgren, D. Oberschmidt, C. Gignoux, J. Delahaye, C. Berger, S. J. Poon, and Ö. Rapp (2000) From weak localization through Magnetoresistance of icosahedral Al-Pd-Re: breakdown to a high-resistivity regime. *Phys. Rev. B* **61**, 3936 - 3950.

D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J. W. Cahn (1984) Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 – 1953.

Figura 1. Representación esquemática de un cuasicristal icosaedroal: a) vista lateral de la base recíproca, b) proyección de los vectores bases en el plano perpendicular al eje de rotación de orden 5.

Figura 2. Representación de las primeras cuasizonas de brillouin: a lo largo de un eje de rotación de orden 5 (izquierda) a lo largo de un eje de rotación de orden 3 (derecha).

Figura 3. Un patrón de Penrose para la estructura cuasicristalina Al-Pd-Mn.

Figura 1

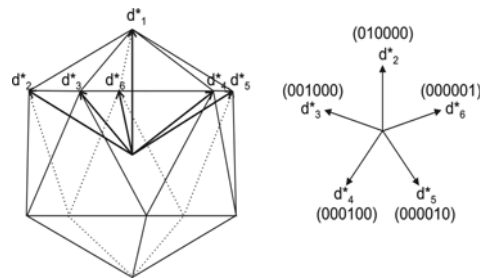


Figura 2

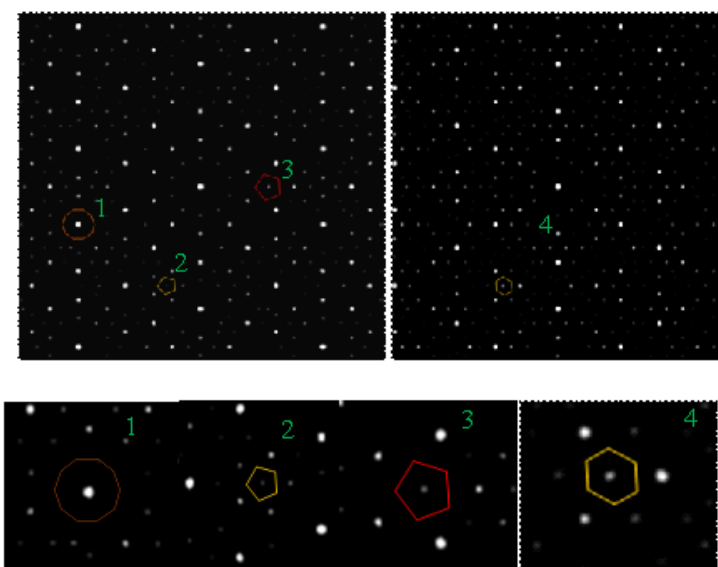
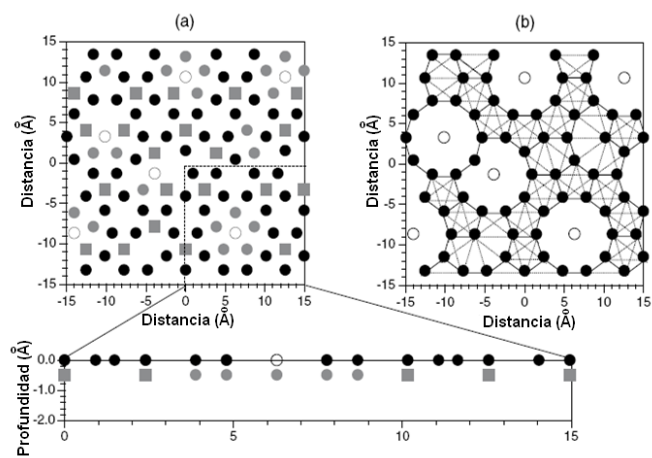


Figura 3



Resumen Curricular

Ramón López Planes

Doctor en Ciencias

Mg Sc. en Física

Lic. en Física

Profesor Investigador

Universidad de Oriente

Departamento de Física, Escuela de Ciencias, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245

ralopez@sucre.udo.edu.ve

Jesús Córdoba

Estudiante Tesista

Licenciatura en Física

Universidad de Oriente

Departamento de Física, Escuela de Ciencias, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245

Verónica del Valle González malavé

Lic. en Física

Profesor Investigador

Universidad de Oriente

IIBCA, Cumaná, 6101, Venezuela A.P. 245